

**Aplikace chemického transportního modelu
v detailním měřítku uliční sítě města:**

**Metodika pro zjemnění výstupů chemického transportního
prostřednictvím lokální aplikace Gaussovského modelu**

Zpracoval: Český hydrometeorologický ústav
Na Šabatce 17, 143 06 Praha 4 - Komořany

České vysoké učení technické
Fakulta dopravní, Konviktská 20, 110 00 Praha 1

ATEM – Ateliér ekologických modelů, s. r. o.
Roztylská 1860/1, 148 00 Praha 4

Odpovědná osoba:
Ondřej Vlček (vlcek@chmi.cz)

Řešitelé: ČHMÚ: Nina Benešová, Jana Ďoubalová
ČVÚT: Marek Brabec
ATEM: Radek Jareš

Oponenti:
prof. RNDr. Jan Bednář, CSc. – Katedra fyziky atmosféry, Matematicko-fyzikální fakulta,
Univerzita Karlova v Praze
prof. RNDr. Ivan Holoubek, CSc. – Centrum pro výzkum toxických látek v prostředí,
Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita

Tato metodika je výsledkem řešení výzkumného projektu TA ČR č. TA04020797
„Emisní procesor nové generace využívající nově dostupné zdroje“.

OBSAH

Seznam použitých zkratk	3
1 Cíl	4
2 Úvod do problematiky	4
3 Popis metodiky	6
3.1 Kalibrace kombinovaného modelu na staniční měření	7
Konkrétní příklad kalibračního modelu pro PM ₁₀	9
3.2 Specifika při aplikaci lokálního modelu nezahrnujícího chemismus – dopčet koncentrací ozonu.....	11
4 Aplikace metodiky pro Prahu	13
4.1 Suspendované částice PM ₁₀	15
4.2 Oxid dusičitý	17
4.3 Ozon.....	19
5 Novost a poznámky k praktické aplikaci metodiky	19
6 Popis uplatnění a ekonomické aspekty	20
7 Závěr	20
8 Literatura	22
Přílohy	23
Příloha 1. Rešerše metod mapování kvality ovzduší na městské úrovni	23
Kombinace regionálního a lokálního modelu	23
Speciální modely zohledňující vliv liniových zdrojů.....	27
Přístupy založené na GIS.....	27
CFD modely.....	28
Využití modelu CALPUFF.....	28
Literatura.....	29
Příloha 2. Statistiky použité při verifikaci	31

Seznam použitých zkratk

CAMx	Comprehensive Air Quality Model with Extensions
CMAQ	Community Multiscale Air Quality Modeling System
CTM	Chemický transportní model
EMEP	European Monitoring and Evaluation Programme
GAM	Generalized Additive Model
NO ₂	Oxid dusičitý
O ₃	Ozon
OMI	Ozone Monitoring Instrument
PM ₁₀	Suspendované částice PM ₁₀
PM _{2,5}	Suspendované částice PM _{2,5}
UCAR	University Corporation for Atmospheric Research

1 Cíl

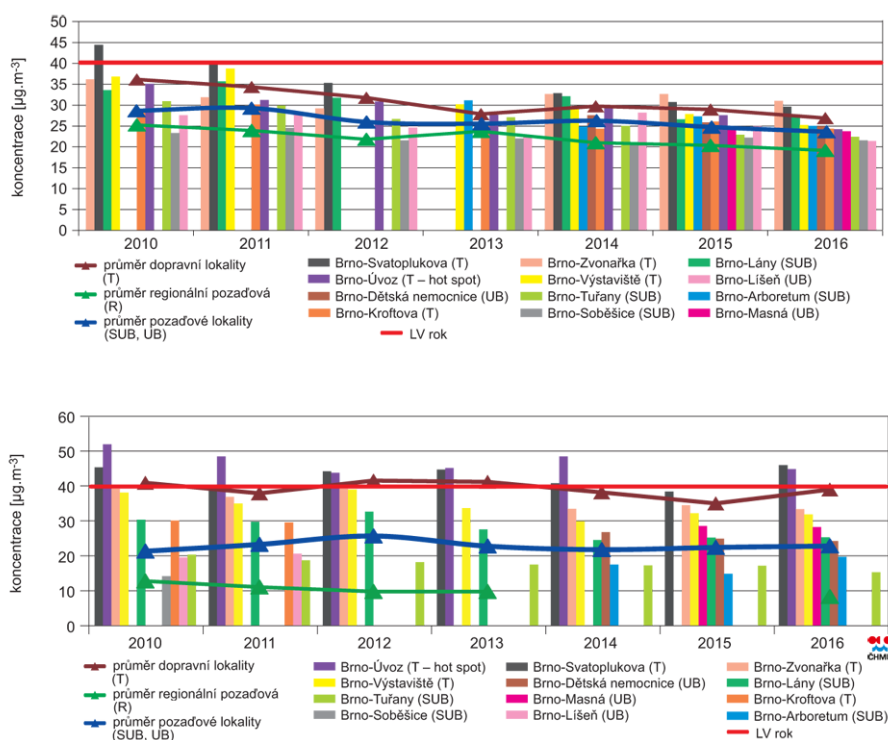
Podíl městského obyvatelstva v České republice činil v roce 2011 73 %. Z toho 45 % těchto lidí žilo ve městech s více jak 50 tis. obyvateli a 30 % ve městech s více jak 100 tis. obyvateli (Svobodová et al. 2018). Mapování kvality ovzduší, které v rámci každoročního hodnocení provádí Český hydrometeorologický ústav (ČHMÚ), sice ve svém přístupu rozlišuje městské a venkovské oblasti (ČHMÚ 2017, kap. XII), ale rozlišení těchto map je 1 x 1 km a je tak zřejmé, že odráží zejména pozadové koncentrace znečišťujících látek (ať již ve venkovském, nebo městském prostředí). Ze strany velkých měst, jako jsou aglomerace Praha, Brno a Ostrava/Karviná/Frýdek-Místek, přitom existuje stále silnější poptávka po podrobnějším mapování kvality ovzduší na jejich území.

V České republice probíhalo do roku 2015 pravidelné hodnocení koncentrací znečišťujících látek na úrovni měst v rozlišení vyšším než 1 km, pokud je nám známo, pouze pro území měst Praha a Brno a to výhradně s využitím Gaussovských rozptylových modelů. Tento postup sice umožňuje provedení výpočtu v poměrně vysokém rozlišení, ale na druhou nedovoluje zohlednění sekundárních znečišťujících látek vznikajících chemickými reakcemi v ovzduší (vyjma oxidu dusičitého NO_2). Mezi sekundární znečišťující látky přitom patří i sekundární aerosoly, které se významnou měrou podílí na celkové koncentraci suspendovaných částic PM_{10} , resp. $\text{PM}_{2,5}$ a ozon (O_3). Problematický je i odhad n-tých nejvyšších koncentrací, pro něž jsou stanoveny imisní limity.

Protože je automobilová doprava významným zdrojem znečištění ovzduší v městských aglomeracích a např. v Praze se jedná o dominantní zdroj emisí PM_{10} a oxidů dusíku, bylo jedním z cílů projektu TA ČR č. TA04020797 vytvořit ověřený metodický postup pro zpřesnění vyjádření imisní situace v blízkosti automobilových komunikací. Tento postup měl spočívat v kombinaci výstupů chemického transportního a lokálního rozptylového modelu (důvody této volby jsou vysvětleny níže) a umožňovat výpočet časových řad koncentrací znečišťujících látek po hodinách, vyčíslení koncentrací sekundárních aerosolů, modelování koncentrací ozónu, a zohledňovat reálné meteorologické podmínky v daném období. Požadované prostorové rozlišení bylo minimálně 333 m. Vhodnost metodiky měla být doložena ověřením shody s měřením na stanicích automatizovaného imisního monitoringu, umístěných v blízkosti významných komunikací. Metodika měla být certifikována MŽP. Jak bude ukázáno níže, použití navržené metodiky není omezeno na hodnocení vlivu komunikací, ale ji použít i k zohlednění ostatních zdrojů znečišťování ovzduší nacházejících se na území města, nebo v jeho okolí.

2 Úvod do problematiky

Koncentrace znečišťujících látek v městském prostředí vykazují výraznou prostorovou proměnlivost a velmi se liší mezi jednotlivými typy lokalit, resp. měřicích stanic. Na Obr. 1 je pro aglomeraci Brno ukázán roční průměr PM_{10} a NO_2 na jednotlivých typech stanic. Kromě rozdílů v absolutních hodnotách koncentrací je z obrázku mj. zřejmé, že rozdíly závisí i na druhu znečišťující látky. Zatím co rozdíl mezi průměrnou roční koncentrací na městských pozadových a dopravních stanicích činí pro PM_{10} cca $5 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, u NO_2 se může jednat až o $20 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$. Bezprostřední okolí dopravních komunikací je navíc charakterizováno výrazným poklesem koncentrací s rostoucí vzdáleností. Největší gradienty lze očekávat do vzdáleností desítek až stovek metrů.



Obr. 1 Průměrné roční koncentrace PM₁₀ (nahore) a NO₂ (dole) na vybraných lokalitách a jednotlivých typech stanic (dopravních – T, (před)městských pozadových – (S)UB a regionálních pozadových – R) v aglomeraci Brno v letech 2007–2016 (ČHMÚ, 2017).

Z výše uvedeného je patrné, že má-li být popsáno pole koncentrací v okolí dopravně zatížených lokalit, je třeba do hodnocení zahrnout jak příspěvek regionálního a městského pozadí, tak lokální příspěvek dopravy. Při hodnocení regionálního pozadí je třeba vzít v úvahu zdroje znečištění vzdálené desítky nebo i stovky kilometrů. Při transportu na tyto vzdálenosti již hraje důležitou roli chemismus a tvorba sekundárních znečišťujících látek – např. sekundárních aerosolů, NO₂, nebo ozonu. Pro tyto účely jsou vhodné např. Eulerovské chemické transportní modely (CAMx, CMAQ, EMEP apod.). Jejich omezením je ale horizontální rozlišení, které nemůže klesnout pod stovky metrů. Například v rámci projektu URBAN HEAT ISLAND (UHI)¹ byla týmem kolem dr. Reslera vyzkoušena aplikace chemického transportního modelu CMAQ na území Prahy ve vysokém rozlišení (333 m), ale ta se pro praktické použití jevila jako příliš náročná (ať již z důvodu přípravy vstupních dat, nebo výpočetního času). Běžně se rozlišení chemických transportních modelů pohybuje v řádech jednotek km. To však při popisu příspěvků vzdálených zdrojů nevádí, neboť jejich pole je již poměrně homogenní. Jinou možností je použití různých statistických přístupů – např. interpolace staničních měření z pozadových stanic a využití dalších doplňkových informací, jako jsou kategorie zemského povrchu, hustota obyvatel apod.

Při modelování lokálních příspěvků jednotlivých zdrojů (ať dopravních komunikací nebo bodových stacionárních zdrojů) je třeba zejména postihnout gradienty koncentrací v jejich bezprostředním okolí (desítky až stovky metrů). Protože jsou tyto zdroje zpravidla obklopeny městskou zástavbou, realistický popis pole proudění a rozptylu znečištění v jejich okolí by vyžadoval aplikaci pokročilých metod (např. Computational Fluid Dynamics (CFD) modelů). Tyto metody jsou však velmi náročné na výpočetní prostředky a pro praktické hodnocení (roční výpočty) se proto zatím nepoužívají, nebo se využívá předpočítaných katalogů pro různé typy meteorologických podmínek, které se následně kombinují podle skutečné situace. Dalším možným přístupem je

¹ Vyhodnocení urbanistických záměrů pilotní akce UHI – WP6.2.2, Závěrečná zpráva. Projekt byl součástí projektu spolufinancovaného z programu [Central Europe Development and application of mitigation and adaptation strategies and measures for counteracting the global Urban Heat Islands phenomenon](http://eu-uhi.eu/cz/). WWW: <http://eu-uhi.eu/cz/>

výpočet lokálních příspěvků jednoduchými, ale výpočetně efektivními Gaussovskými modely, popř. parametrickými modely specializovanými na uliční kaňony s vědomím jejich omezení, které je třeba brát v potaz při interpretaci výsledných map.

V příloze (Příloha 1) je pro úplnost uvedena rešerše různých přístupů k mapování kvality ovzduší ve městech. Vezmeme-li v potaz minimální požadované rozlišení (tj. 333 m) a vynecháme-li CFD modely pro jejich prozatím příliš velkou výpočetní náročnost při aplikaci na doménách zahrnujících celé město, zůstanou nám různé přístupy kombinující regionální a jednoduché lokální modely. Z výše odkazované rešerše se pak jako nejvhodnější a nejvíce propracovaný jeví přístup výzkumné organizace VITO, který byl v rámci předložené metodiky doplněn o kalibraci (fitování) kombinovaného modelu na staniční měření. Výsledná metodika, která je popsána níže, byla použita pro Modelové hodnocení kvality ovzduší na území Hl. m. Prahy.

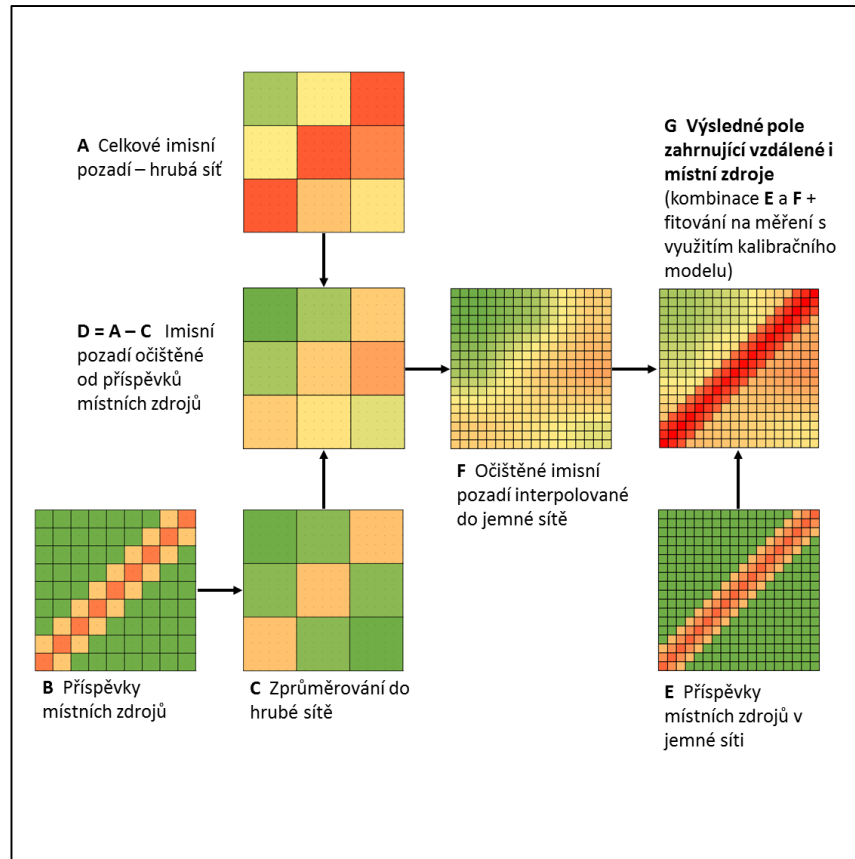
3 Popis metodiky

Navržená metodika vychází z přístupu uvedeného v Lefebvre a kol. (2013a) (viz Příloha 1). I když byla metodika zpracována za účelem zjemnění výstupů chemického transportního modelu prostřednictvím lokální aplikace Gaussovského rozptylového modelu, mohou být jejím vstupem i jiné modely. Pro zdůraznění této skutečnosti je následující text tam, kde je to možné, formulová obecně. Schematicky je postup výpočtu znázorněn na **Obr. 2** a podrobněji rozveden v následujících bodech:

- V hrubé síti je spočteno **imisní pozadí** (Obr. 2 A). Metodika nepředpokládá konkrétní model imisního pozadí – může se jednat o chemický transportní model, nebo např. o interpolaci měření na požadových stanicích.
- V jemné síti mající rozlišení, které je ve výsledku požadováno, jsou lokálním modelem spočteny **příspěvky místních zdrojů ve vysokém rozlišení** (Obr. 2 E). Metodika opět nepředpokládá konkrétní typ lokálního rozptylového modelu.
- Vzhledem k tomu, že emise z místních zdrojů jsou zahrnuty i v odhadu imisního pozadí a pouhým sečtením výstupů lokálního modelu a imisního pozadí by tak došlo k dvojitmu započítávání těchto zdrojů, je nejprve třeba získat **imisní pozadí očištěné od příspěvků místních zdrojů** (Obr. 2 D). K tomu účelu je provedeno **zprůměrování příspěvků místních zdrojů** spočtených lokálním modelem **do hrubé sítě imisního pozadí** (Obr. 2 C). V tomto kroku je třeba vzít v úvahu, co reprezentují mapy imisního pozadí. Pokud se jedná o přízemní koncentrace, je pro toto očištění postačující vzít příspěvky lokálních zdrojů spočtené ve stejné výšce nad zemí. Pokud je ale imisní pozadí stanoveno např. chemickým transportním modelem (CTM), pak jeho hodnoty odpovídají průměrné koncentraci v buňce o objemu $(dx)^2 \times dz$, kde dx je horizontální rozlišení a dz výška horní hranice první vrstvy CTM (zpravidla desítky m). V tomto případě je vhodné pro toto zprůměrování použít nejen výstupy lokálního modelu spočítané ve standardní výšce 1,5 m, ale i ve vyšších hladinách tak, aby síť referenčních bodů lokálního modelu pokryla rovnoměrně přízemní vrstvu CTM. Může se pak ukázat jako výpočetně výhodné spočítat příspěvky místních zdrojů pro tento účel v poněkud hrubším prostorovém rozlišení, než jaké je výsledně požadované, jak je naznačeno na Obr. 2 B.
- Takto získané **očištěné imisní pozadí je následně interpolováno do výsledné sítě** (Obr. 2 F).
- Interpolované očištěné **imisní pozadí je sečteno s výstupem lokálního modelu** (Obr. 2 G).

Výše uvedené výpočty jsou provedeny pro jednotlivé časové kroky. Je tak získána časová řada map kombinujících imisní pozadí a příspěvky místních zdrojů. V místech stanic imisního monitoringu je pak z těchto map možné exportovat odpovídající časové řady modelových koncentrací. Pokud by výstupy obou modelů byly dostatečně přesné, mohly by být přímo z těchto map spočteny požadované statistiky. V praxi jsou ale modelové výstupy ovlivněny řadou nejistot – od emisních přes meteorologické vstupy až po vlastní modelový výpočet, který nutně zjednodušuje skutečnost. Pokud je například pro hodnocení imisního pozadí využit CTM a numerický model počasí nepostihne správně inverzní situaci, jsou odpovídajícím způsobem podhodnoceny i koncentrace znečišťujících látek. Pro dosažení maximální shody s měřenými daty je tedy vhodné provést kalibraci (fitování) modelu na měření. Protože je předpokládána aplikace metodiky na omezené oblasti, je pravděpodobné, že pro některé látky budeme mít k dispozici málo stanic (někdy pouze jednu). I proto není vhodné (možné) provádět kalibraci odděleně pro jednotlivé časové kroky. Namísto toho byl zvolen postup, kdy je kalibrována časová řada (modelový výstup v místě měření) pokrývající celé hodnocené období. Modelové výstupy je před tím v některých

případech nutné agregovat, aby odpovídaly staničním měřením (např. denní nebo 14denní průměry). V některých případech se může ukázat ze statistického hlediska jako vhodnější použít pro kalibraci ne kombinovaný model, ale jeho jednotlivé složky (požadovou a lokální). Protože je kalibrace naprosto zásadní krok v předkládané metodice, kterým se tato navíc liší od postupu uvedeného v Lefebvre a kol. (2013a) (viz Příloha 1), je tato podrobně popsána v následující podkapitole.



Obr. 2 Schéma kombinace CTM a Gaussovského modelu

3.1 Kalibrace kombinovaného modelu na staniční měření

Základním cílem statistické kalibrace výstupů numerického modelu vůči reálným staničním měřením je zpřesnění odhadů koncentrace sledované látky v čase a prostoru. Vstupem do statistického kalibračního modelu jsou výstupy z kombinovaného modelu M či jeho jednotlivé složky (imisní pozadí B (background) – zde chemický transportní model a lokální příspěvky L – zde Gaussovský model). Kromě toho může kalibrační model používat i jiné vstupy (dodatečné vysvětlující proměnné neboli kovariáty) s cílem využít dodatečných informací (např. prostorově zprůměrovaná změřená hodnota vertikálního teplotního gradientu reprezentující rozptylové podmínky, periodické členy odvozené z časových údajů apod.). Výstupem statistického kalibračního modelu je odhad koncentrace sledované látky. Cílem přitom je aby tento odhad měl lepší dlouhodobé statistické vlastnosti oproti původnímu surovému výstupu z numerického modelu (například menší vychýlení, větší přesnost, menší střední čtvercovou chybu apod.).

Statistický kalibrační model je obecně konstruován jako model regresního typu. Modeluje podmíněné rozdělení sledované látky (jako závisle proměnné) pro dané hodnoty vysvětlujících proměnných (výstupů z numerického modelu, popř. dalších kovariát). Vzhledem k tomu že výstupy numerického modelu vykazují oproti reálně naměřeným hodnotám systematické vychýlení komplikované struktury, je jasné, že pro účely kvalitní kalibrace nevystačíme s lineárním modelem. Jeho použití by snadno mohlo vést ke kalibraci, která by byla horší než samotný nekalibrovaný výstup. Efekty jednotlivých kovariát mohou být (a typicky v praxi jsou) nelineární, s tím že funkční tvar závislosti není a priori znám. Proto musí být realistická kalibrace založena na semiparametrickém statistickém modelu který tvar těchto závislostí zkonstruuje přímo z dat.

Vhodnou, flexibilní a přitom výpočetně dobře zvládnutou třídou statistických regresních modelů je GAM (Generalized Additive Model), Ruppert et al. (2003), Wood (2010). Modely této třídy dovolují použití různých rozdělení závisle proměnné (v rámci exponenciální třídy rozdělení) ale hlavně též neparametrický odhad vztahů mezi její střední hodnotou a jednotlivými vysvětlujícími proměnnými. V kontextu kalibrace výstupů numerického modelu se jeví jako velmi výhodná implementace GAM s penalizovanými spliny, Wood (2010). A to jak díky flexibilitě, výpočetní efektivitě, tak i možnosti využití stávajících softwarových nástrojů. Například je zdarma k dispozici mgcv knihovna v R² (R Core Team 2017). Penalizace splinových koeficientů, na které je mgcv založena, je velmi vhodným prostředkem k regularizaci (a tedy podstatnému zkvalitnění) odhadu neznámých nelineárních komponent modelu. "Sílu penalizace", tedy velikost penalizačních koeficientů lze přitom odhadovat z dat (např. pomocí crossvalidace).

Statistická kalibrace numerických výstupů probíhá obecně ve dvou fázích: i) identifikace (či odhad parametrů modelu i neparametrických komponent) na trénovacích datech, ii) použití odhadnutého modelu na zájmových datech (vyhodnocení dříve odhadnutého modelu na numerických výstupech a dalších kovariátách pro data z období pro které potřebujeme vylepšené odhady).

Kromě základního a přímočarého cíle statistické kalibrace, tedy zpřesnění odhadů koncentrací sledované látky a částečného potlačení případného systematického vychýlení surových numerických výstupů, může dobře zkonstruovaný statistický kalibrační model být využit pro další důležité, prakticky motivované účely. Při vhodně zformulované struktuře vysvětlujících proměnných může být využit ke konstrukci optimalizovaných vah požadových a lokálních (B a L) komponent (ty se mohou odlišovat od jednotkových vah kombinovaného numerického modelu $M=B+L$, např. jako $M'=w_B \cdot B + w_L \cdot L$). Váhy přitom mohou být nejen konstantní ale proměnlivé v čase a/nebo prostoru (např. mohou být závislé na hodnotě B apod.).

Označme Y_{st} koncentraci sledované látky (závisle proměnná) v čase t a prostorovém bodě s a předpokládejme, že má rozdělení $D(\mu_{st}, \Phi)$ exponenciální třídy (např. Gaussovské, gama, apod.) se střední hodnotou μ a případným dalším parametrem Φ (např. pro Gaussovské rozdělení odpovídá Φ rozptylu). Obecný tvar GAM modelu pro statistickou kalibraci je pak následující:

$$Y_{st} \sim D(\mu_{st}, \phi) \quad (1)$$

$$L(\mu_{st}) = \beta_0 + s(M_{st}) + \sum_{k=1}^K \beta_k \cdot x_{k,st} + \sum_{l=1}^L s_l(x_{l,st})$$

kde:

- $L(\cdot)$ je monotónní transformace střední hodnoty μ_{st} , tzv. link, Madsen, Thyregod (2011). V kalibraci se osvědčilo použití kanonického linku (identita pro normální rozdělení).
- μ_{st} je střední hodnota v čase t a prostorovém bodě s , která je modelována jako součet několika komponent spojených s jednotlivými vysvětlujícími proměnnými.
- $X_{\cdot,st}$ jsou dodatečné vysvětlující proměnné, neboli kovariáty
- M_{st} je nejdůležitější člen – kombinovaný výstup z numerického modelu ($M_{st} = B_{st} + L_{st}$).

Funkční tvar příspěvku členu M_{st} není a priori znám (souvisí s neznámou strukturou systematického vychýlení numerického modelu) a proto je odhadován neparametricky. Funkce $s(\cdot)$ je konstruována z dat jako penalizovaný spline. Model může dále obsahovat jednotlivé parametrické členy (může jít např. o efekty dnů v týdnu) i dodatečné hladké komponenty (konstruované jako penalizované spliny v dalších proměnných), tedy funkce $s_l(\cdot)$, $l=1, \dots, L$ (může jít např. o dodatečné informace, které při výpočtu numerického modelu nejsou k dispozici, např. o měřeném vertikálním teplotním gradientu). Při identifikaci modelu jsou všechny neznámé parametry β_k , $k=0, 1, \dots, K$, ale i neznámé koeficienty splinových komponent $s(\cdot)$, s_l , $l=0, 1, \dots, L$, odhadnuty simultánně metodou maximalizace penalizované věrohodnosti s tím, že neznámé penalizační koeficienty jsou odhadnuty pomocí crossvalidace, (Wood, 2010).

² mgcv: Mixed GAM Computation Vehicle with Automatic Smoothness Estimation. WWW: <https://cran.r-project.org/package=mgcv>

V případě, že chceme odhadovat (ne-konstantní) váhy B a L složek, můžeme systematickou část statistického kalibračního modelu modifikovat např. takto:

$$L(\mu_{st}) = \beta_0 + s_B(B_{st}) + s_L(L_{st}) + \sum_{k=1}^K \beta_k \cdot x_{k,st} + \sum_{l=1}^L s_l(x_{l,st}) \quad (2)$$

Volba typu rozdělení (D) je pro správnou kalibraci velmi důležitá. Obecně platí, že pro kalibrační model s menším časovým rozlišením (např. denním pro data látky, jejichž věrohodná měření jsou pro kalibraci k dispozici až např. na úrovni denních průměrů) nemusí být špatnou volbou rozdělení Gaussovské. Pro látky kalibrované s vysokým časovým rozlišením (např. hodinovým) a zejména pro ty které se vyskytují v nízkých koncentracích je zpravidla výhodné před modelováním data logaritmovat (tedy $Y_{st} = \log(\text{koncentrace}_{st})$). Efektivně pak předpokládáme logaritmicko-normální rozdělení původních dat a modelujeme jeho medián. Jsou-li v datech nulová měření, je nutné před logaritmováním měřené hodnoty posunout (např. přičtením poloviny nejmenší nenulové měřené hodnoty apod.). V komplikovanějších případech lze testovat též gama a/nebo inverzní gaussovské rozdělení.

Tvar kalibračního modelu (tedy volba vysvětlujících proměnných a volba toho, které z nich budou vstupovat ve formě parametrických členů a které ve formě neparametrické) se může lišit (a typicky i hodně liší) dle konkrétní sledované látky, požadovaného časového rozlišení (např. pro kalibraci s malým časovým rozlišením nemůžeme počítat s bohatým modelem ani v případě že pro něj máme bohatou fyzikální/chemickou motivaci). Struktura kalibrace může být ale odlišná i v různých lokalitách. Struktura systematického vychýlení numerického modelu totiž může být v různých městech dosti jiná – např. kvůli různé kvalitě emisních vstupů ale i z fyzikálních (odlišné proudění apod.) a jiných důvodů.

Výběr konkrétního tvaru modelu není automatickou (ani automatizovatelnou) záležitostí. Musí být proveden pečlivě ve spolupráci experta na čistotu ovzduší, numerického modeláře a statistika. Tvorba modelu typicky probíhá variantně, s tím že před-selekce je založena formalizovaných kritériích (např. AIC, Akaikeho informační kritérium, Anderson (2008)). Užší výběr je pak založen na crossvalidaci a/nebo ověření na validačních datech která nebyla použita při identifikaci modelu (je třeba ovšem dát pozor aby validační data rozumně pokrývala oblast zájmu - aby tedy validační data nebyla pouze např. ze zimního období apod.) ale i na posouzení interpretace odhadu jednotlivých komponent statistického kalibračního modelu – tedy jednotlivých aditivních členů na pravé straně vztahu ve druhém řádku (1).

Konkrétní příklad kalibračního modelu pro PM₁₀

Konkrétním příkladem vyselektovaného statistického kalibračního modelu může být model pro kalibraci kombinovaného výstupu numerického modelu ($M_{st} = B_{st} + L_{st}$) PM₁₀ v denním časovém rozlišení. Jde o GAM následujícího tvaru:

$$PM10_{st} = M_{st} + \sum_{k=1}^7 \beta_k \cdot I(t \text{ je den typu } k) + s(M_{s,t-1} - M_{st}) + s_P(P(t)) \cdot grd_t + \varepsilon_{st} \quad (3)$$

$$\varepsilon_{st} \sim N(0, \sigma^2)$$

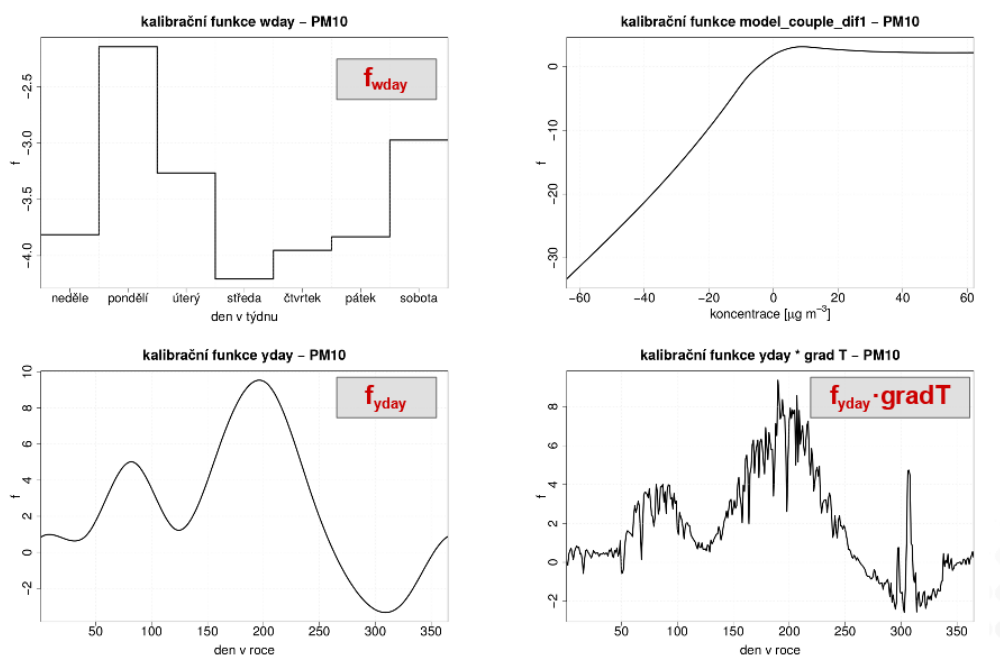
kde:

- t je den měření (indexovaný od počátku kalibračních dat)
- $P(t)$ je pořadí dne t uvnitř roku
- grd_t je prostorově průměrovaná hodnota vertikálního gradientu teploty (v daném čase je použita stejná hodnota pro celé modelované území)
- $I(\cdot)$ je indikátorová funkce, nabývající hodnoty 1 pokud je její argument pravdivý a 0 pokud nikoliv
- $s(\cdot)$ je konstruována jako kubický spline
- $s_P(\cdot)$ je konstruována jako periodický kubický spline (aby měla význam ročně periodického členu)
- ε_{st} je normálně rozdělená chyba s nulovou střední hodnotou a směrodatnou odchylkou σ

Jde o gaussovský regresní GAM model s několika speciálními rysy. Z konzervativních důvodů výstup z numerického modelu vstupuje jako M_{st} , tedy s nuceně jednotkovým koeficientem (jedná se o tzv. offset). Dále model automaticky provádí korekci na den v týdnu (souvisí se systematickými chybami v emisních rozpočtech vstupujících do numerického modelu). Suma $\beta_k = 1, \dots, 7$ ($\beta_k \cdot I(t \text{ je den typu } k)$), tedy wday komponenta v **Obr. 3**, je

jedna ze standardních parametrizací submodelu ANOVA typu (tzv. textbook parametrizací). Pondělí je číslováno jako 1. Člen $s(M_{s,t-1} - M_{st})$ (tedy model_couple_dif1 komponenta v **Obr. 3**) provádí důležitou korekci dynamiky odhadu. Původní numerický výstup totiž vykazuje tzv. undersmooth chování (přesvědčí variabilní, jehož nemalou součástí je šum nekorelovaný se skutečným chodem měření a který je třeba potlačit). Tento člen tedy vyhlazuje část neužitečného šumu bez toho, aby příliš poškodil skutečný signál (přímé vyhlazování trajektorie numerického odhadu se k tomuto účelu naprosto nehodí). Člen $s_P(P(t)) \cdot grad_t$ (tedy komponenta yday*grad T a její složka yday či $s_P(P(t))$ v **Obr. 3**) je tzv. TVAR (time-varying coefficient), Hastie, Tibshirani (1996) submodelem. TVAR (sub)model dovoluje u (lokálně) lineárního vztahu mezi koncentrací PM_{10} a vertikálním teplotním gradientem (hladkou) změnu směrnici v průběhu roku. Průběh změny směrnice je (ročně) periodický, sezónní (díky použitému periodickému kubickému splinu).

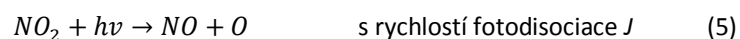
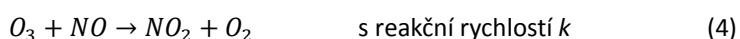
Tento model nejen že vylepšuje podstatným způsobem odhady PM_{10} oproti původnímu výstupu numerického modelu (díky částečnému potlačení jeho systematického vychýlení i šumu), ale poskytuje také cennou informaci o důležitých zdrojích chyb v numerickém modelu. Stává se tak cenným nástrojem pro eventuální ladění numerických výpočtů v budoucnosti. **Obr. 3** zobrazuje funkční tvar odhadnutých a extrahovaných komponent modelu (3). Ty poukazují na: i) systematické vychýlení v emisních rozpočtech jednotlivých dnů v týdnu, které následně způsobuje systematické vychýlení numerického modelu, ii) příliš "aktivní" dynamiku trajektorie numerického výstupu (vzhledem k častému nesouladu měřených dat a numerického modelu kalibrační model smršťuje prudké nárůsty koncentrací k průměru, zatímco poklesy ponechává téměř v původních hodnotách), iii) výraznější "nedotahování" koncentrací PM_{10} numerickým modelem v některých částech roku (kdy se výrazně uplatňuje dodatečná informace o měřeném vertikálním gradientu).



Obr. 3 Extrahované komponenty kalibračního modelu (3) pro PM_{10} .

3.2 Specifika při aplikaci lokálního modelu nezahrnujícího chemismus – dopočet koncentrací ozonu

Výše uvedeným postupem je možné hodnotit koncentrace látek, pro které existuje modelový výstup jak z modelu imisního pozadí, tak lokálního rozptylového modelu. Pokud ale použijeme pro výpočet příspěvků místních zdrojů model nezahrnující chemismus (to jsou i referenční³ Gaussovské rozptylové modely ATEM a SYMOS), můžeme jím hodnotit pouze rozptyl primárně emitovaných a ne příliš reaktivních látek. To je naprostá většina látek, které mají stanoven imisní limit. Výjimku tvoří oxid dusičitý, pro nějž ale zpravidla i velmi jednoduché modely obsahují příslušnou parametrizaci umožňující výpočet jeho koncentrací. Problém pak přetrvává v případě přízemního ozonu, který vzniká chemickými reakcemi v atmosféře ze svých prekurzorů (oxidů dusíku a těkavých organických látek) a Gaussovskými rozptylovými modely není počítán. Pro odhad jeho koncentrací je pak možné vyjít z různých zjednodušujících předpokladů chemické rovnováhy mezi ozonem a jeho prekurzory. Zatím co koncentrace oxidů dusíku je možné výše uvedeným postupem získat, informace o koncentracích těkavých organických látek nejsou zpravidla ve vysokém rozlišení k dispozici. Proto jsme pro účely této metodiky vyšli z cyklu chemických reakcí mezi oxidy dusíku a ozonem – rovnice (4)–(6):



Časovou změnu koncentrace NO_2 v důsledku výše uvedených reakcí lze popsat rovnicí (7):

$$\frac{d[NO_2]}{dt} = -J \cdot [NO_2] + k \cdot [NO] \cdot [O_3], \quad (7)$$

kde J vyjadřuje rychlost fotodisociace NO_2 a k rychlost reakce ozonu a oxidu dusnatého. Předpokládáme-li, že se každou hodinu koncentrace nacházejí v rovnovážném stavu, pak časová derivace v rovnici (7) je rovna nule a rovnováhu mezi koncentracemi O_3 , NO a NO_2 lze zapsat rovnicí (8):

$$[O_3] = \frac{[NO_2]}{[NO]} \cdot \frac{J}{k} \quad (8)$$

Tento předpoklad lze samozřejmě uplatnit pouze během denní doby ($J \neq 0$). Vzhledem k tomu, že ozon má stanoven imisní limit pro 26. nejvyšší denní maximum klouzavého 8hodinového průměru a maximální koncentrace ozonu nastávají během denních hodin, je toto omezení přijatelné. Protože NO nemá stanoven imisní limit a jeho výpočet bude prováděn pouze za účelem stanovení poměru NO_2 a NO , je vhodné neodvozovat koncentraci NO nezávisle na NO_2 , protože by tak bylo možné získat nereálné poměry jejich koncentrací. Spíše je vhodné odvozovat přímo vlastní poměr.

Reakční rychlost k je možné počítat z teploty vzduchu. Nejnovější revidované funkční závislosti uvádí na svých stránkách International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC 2014). Pro ověření metodiky na modelovém hodnocení Hl. města Prahy (viz níže) byla použita rovnice s parametry uvedenými v manuálu chemického transportního modelu CAMx (ENVIRON, 2014), který odpovídá revizi dokumentu IUPAC z ledna 2010 (Atkinson et al. 2010):

$$k = 1,4 \cdot 10^{-12} \cdot \exp\left(-\frac{1310}{T}\right), \quad (9)$$

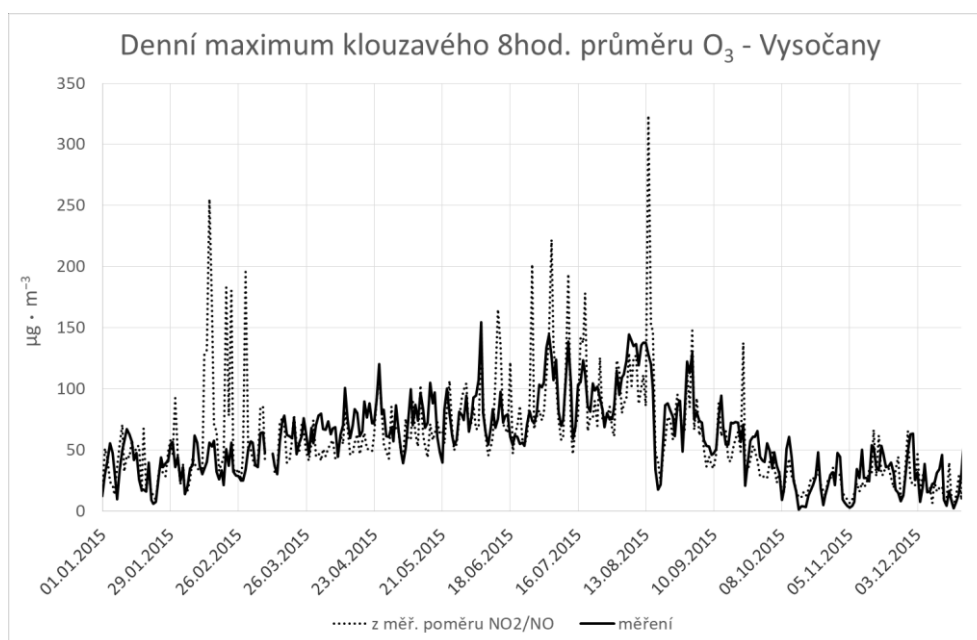
kde T je teplota v kelvinech. Určení rychlosti fotodisociace J je možné různými způsoby. Protože byla popisovaná metodika ověřována s využitím výstupů modelu CAMx, byly použity hodnoty J počítané jeho preprocesorem TUV (Tropospheric Ultraviolet-Visible (TUV) radiation model, version 4) na základě informace o celkovém ozonovém sloupci ze satelitního instrumentu OMI⁴. Program TUV je i samostatně ke stažení na stránkách UCAR⁵.

³ Modely ATEM a SYMOS jsou uvedeny jako referenční modely pro hodnocení kvality ovzduší ve vyhlášce 330/2012 Sb., o způsobu posuzování a vyhodnocení úrovně znečištění, rozsahu informování veřejnosti o úrovni znečištění a při smogových situacích.

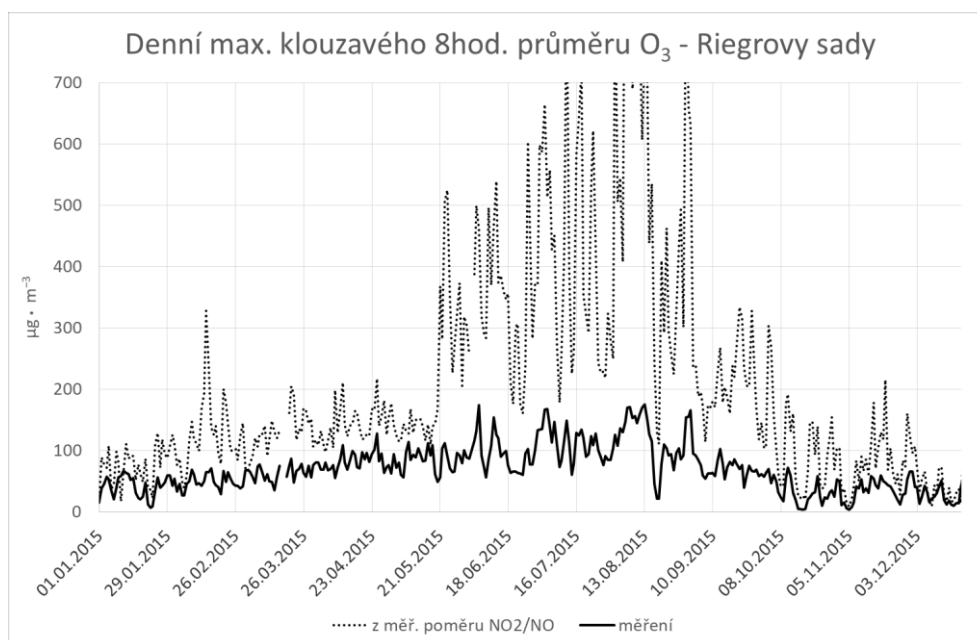
⁴ Ozone Monitoring Instrument (OMI) / AURA: <ftp://jwocky.gsfc.nasa.gov/pub/omi/data/ozone/>

⁵ <https://www2.acom.ucar.edu/modeling/tropospheric-ultraviolet-and-visible-tuv-radiation-model>

Použitelnost výše uvedeného dopočtu koncentrací ozonu byla vyzkoušena na pražských stanicích Praha 9-Vysočany a Praha 2-Riegrovy sady, které měří souběžně koncentrace oxidů dusíku i ozonu (stanice Vysočany jako jediná dopravní stanice v Praze). Jako teplota byl použit průměr z pražských stanic Karlov, Kbely, Ruzyně a Libuš. Výsledné časové řady jsou na **Obr. 4** a **Obr. 5**. Na dopravní stanici Vysočany vidíme poměrně dobrou shodu měřených a vypočtených hodnot, i když vypočtené hodnoty jsou zpravidla vyšší. 26. nejvyšší denní maximum klouzavého 8hodinového průměru ozonu je nadhodnoceno o 17 %. Zcela jinak ale vypadá situace na městské požadové stanici Riegrovy sady: korelace měřených a dopočtených řad je sice vyšší, než na stanici Vysočany (0,82), ale vypočtené hodnoty jsou několikanásobně vyšší, než měření – zejména během letního období. Z uvedeného lze soudit, že výpočet dá poměrně dobrou představu o koncentracích ozonu v blízkosti dopravních komunikací, ale na požadových lokalitách bude hodnota výrazně nadhodnocena. Ukáže-li se mezi modelovými výsledky a měřeními daty lineární vazba, je možné díky ní vypočtené hodnoty korigovat. Takto získané mapy ozonu je ale třeba brát pouze jako orientační. Pro přesnější výpočet koncentrací ozonu v požadovaném prostorovém rozlišení by bylo třeba mít informace o koncentracích jeho dalších prekurzorů (radikálů těkavých organických látek), jejichž významným zdrojem jsou i biogenní zdroje, zejména lesní porosty.



Obr. 4 Koncentrace ozonu na dopravní stanici Praha 9-Vysočany (AVYNA): plná čára – staniční měření, tečkovaná čára – dopočet z měřených koncentrací NO a NO₂ za předpokladu fotochemické rovnováhy. Korelace 0,69; 26. nejvyšší denní maximum klouzavého 8h průměru O₃ (měření: 108, výpočet: 126 µg m⁻³).



Obr. 5 Koncentrace ozonu na městské pozadové stanici Praha 2-Riegrovy sady (ARIEA): plná čára – staniční měření, tečkovaná čára – dopočet z měřených koncentrací NO a NO₂ za předpokladu fotochemické rovnováhy. Korelace 0,82; 26. nejvyšší denní maximum klouzavého 8h průměru O₃ (měření: 131, výpočet: 538 µg m⁻³).

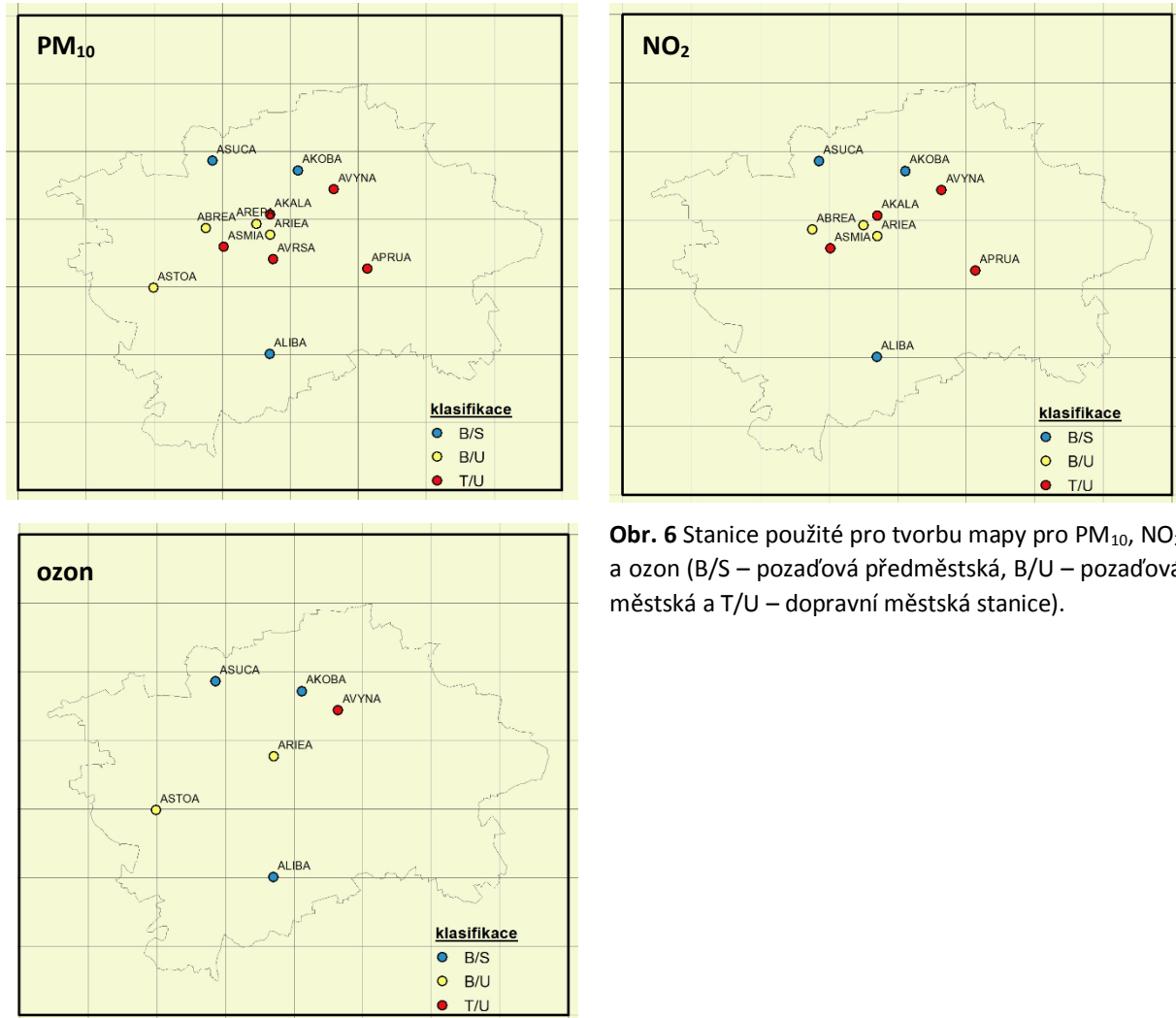
4 Aplikace metodiky pro Prahu

Uvedená metodika byla v rámci její přípravy ověřena aplikací pro území Hl. m. Prahy na datech pro rok 2015. Vzhledem k tomu, že Český hydrometeorologický ústav používá k ročnímu hodnocení kvality ovzduší mj. chemický transportní model CAMx (např. ČHMÚ 2017), byla nasnadě kombinace jeho výstupů s výsledky lokálního Gaussovského modelu ATEM, který je dlouhodobě používán k modelovému hodnocení kvality ovzduší na území Hl. m. Prahy. Postup výpočtu byl následující:

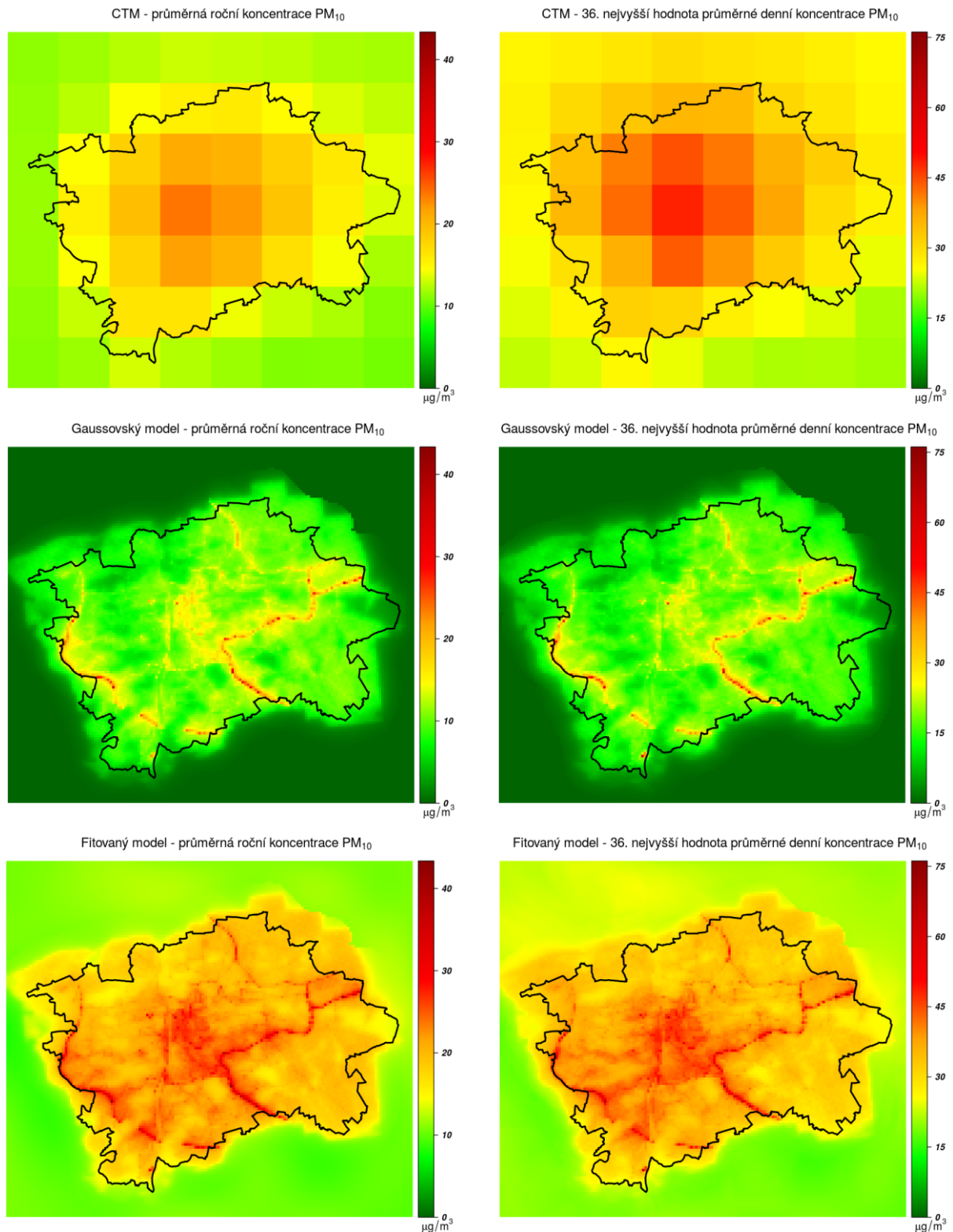
- pro každou hodinu bylo spočteno pole koncentrací CTM CAMx v rozlišení 4,7 x 4,7 km, které odpovídá současnému rozlišení operativní verze meteorologického předpovědního modelu ALADIN. Výpočet CTM zahrnoval emisní zdroje z oblastí širší střední Evropy;
- pro každou hodinu byly spočteny příspěvky lokálních zdrojů Gaussovským modelem ATEM. Meteorologie pro tento výpočet byla získána programem CALMET (Scire et al. 2000), na jehož vstupu byla měření ze stanic Praha–Ruzyně, Praha–Kbely, Praha–Libuš a Praha–Karlov a sondážní měření na stanici Praha–Libuš. Území bylo z hlediska meteorologie rozděleno do 142 oblastí, se kterými standardně pracuje model ATEM;
- příspěvky Gaussovského modelu počítané v hladinách 1,5, 20 a 39 m nad zemí byly zprůměrovány do gridu CTM (průměrná výška 1. vrstvy 50 m) a odečteny od koncentrací CTM modelu, aby se zamezilo dvojímu započítávání emisí. V případě, že byl rozdíl záporný, byl nahrazen nulovou hodnotou;
- očištěné výstupy z CTM modelu byly následně bilineárně interpolovány do výpočetní sítě Gaussovského modelu a sečteny s jeho příspěvky;
- Byla provedena kalibrace na staniční měření. Mezi kovariáty byly použity časové proměnné (pořadí dne v týdnu, den v roce apod.) a teplotní gradient (jeho průměrná hodnota pro území Hl. města Prahy);

Uvedeným postupem jsou získány mapy průměrných hodinových, případně denních koncentrací, které umožňují hodnotit kvalitu ovzduší jak ve vztahu k ročním, tak krátkodobým (hodinovým a denním) hodnotám imisních limitů a povoleným dobám překročení. Níže uvádíme výsledky pro suspendované částice PM₁₀ (roční průměr a 36. nejvyšší denní průměr), NO₂ (roční průměr a 19. nejvyšší hodinový průměr) a ozon (26. nejvyšší denní maximum klouzavého 8hodinového průměru). Jsou uvedeny jednak mapy pro neupravený CTM, samotný Gaussovský model a kalibrovaný model. Dále jsou uvedeny scatterploty a statistické charakteristiky pro neupravený CTM, samotný Gaussovský model, nekalibrovanou kombinaci CTM a Gaussovského modelu

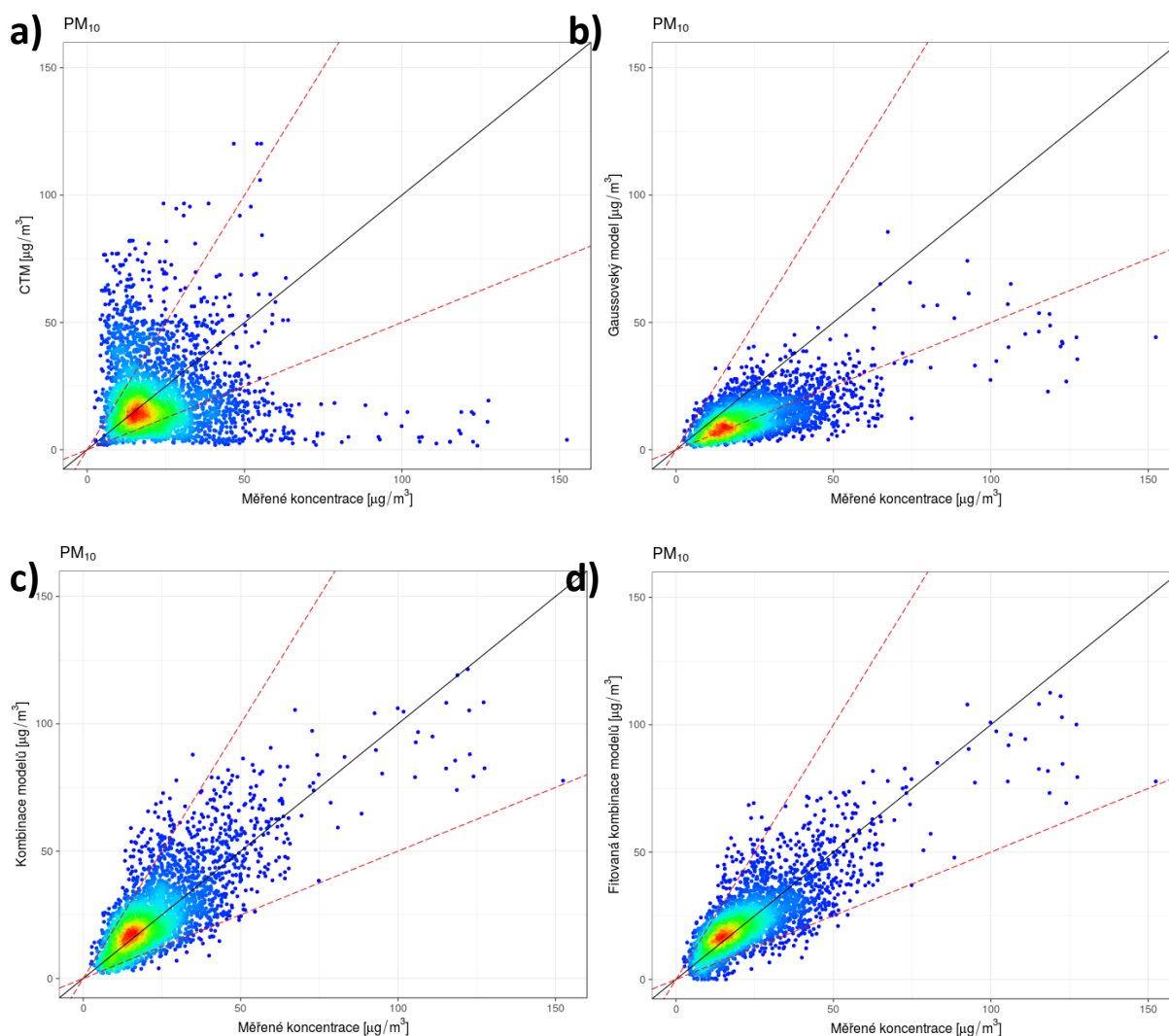
a výsledný kalibrovaný model. Definiční vztahy statistik uváděných v **Tab. 2** a **Tab. 1** jsou v příloze (Příloha 2). Stanice, které byly k dispozici pro kalibraci modelu, jsou uvedeny na **Obr. 6**.



Obr. 6 Stanice použité pro tvorbu mapy pro PM₁₀, NO₂ a ozon (B/S – pozad'ová předměstská, B/U – pozad'ová městská a T/U – dopravní městská stanice).

4.1 Suspendované částice PM₁₀

Obr. 7 PM₁₀ – mapy pro CTM (nahore), Gaussovský model (uprostřed) a výsledná fitovaná mapa (dole). Roční průměr (vlevo) a 36. nejvyšší denní průměr (vpravo) – barevná škála stejná vždy pro levý/pravý sloupec.

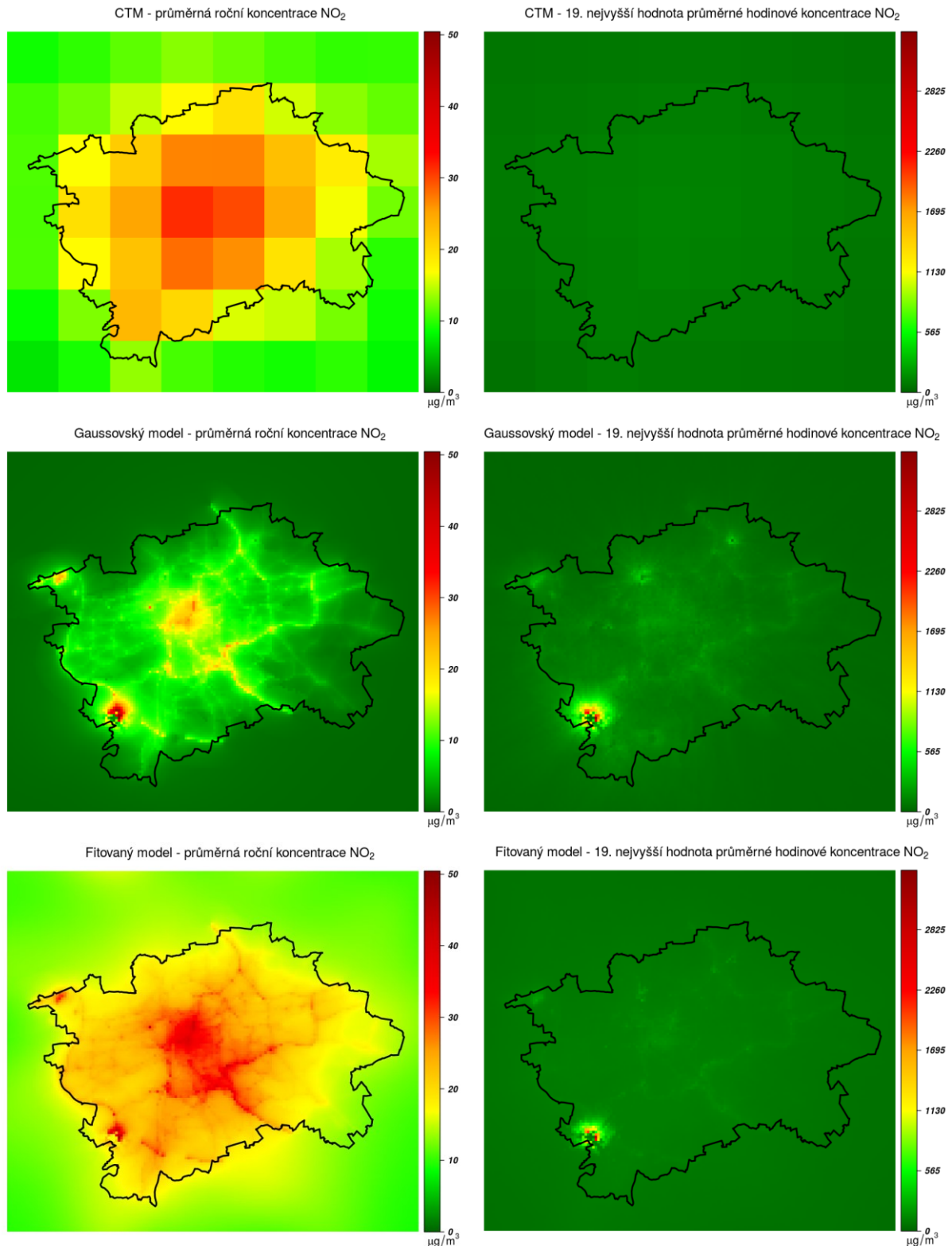


Obr. 8 PM₁₀ – scatterploty denních průměrů pro CTM (a), Gaussovský model (b), kombinaci CTM a Gaussovského modelu (c) a výsledný model fitovaný na stanici (d).

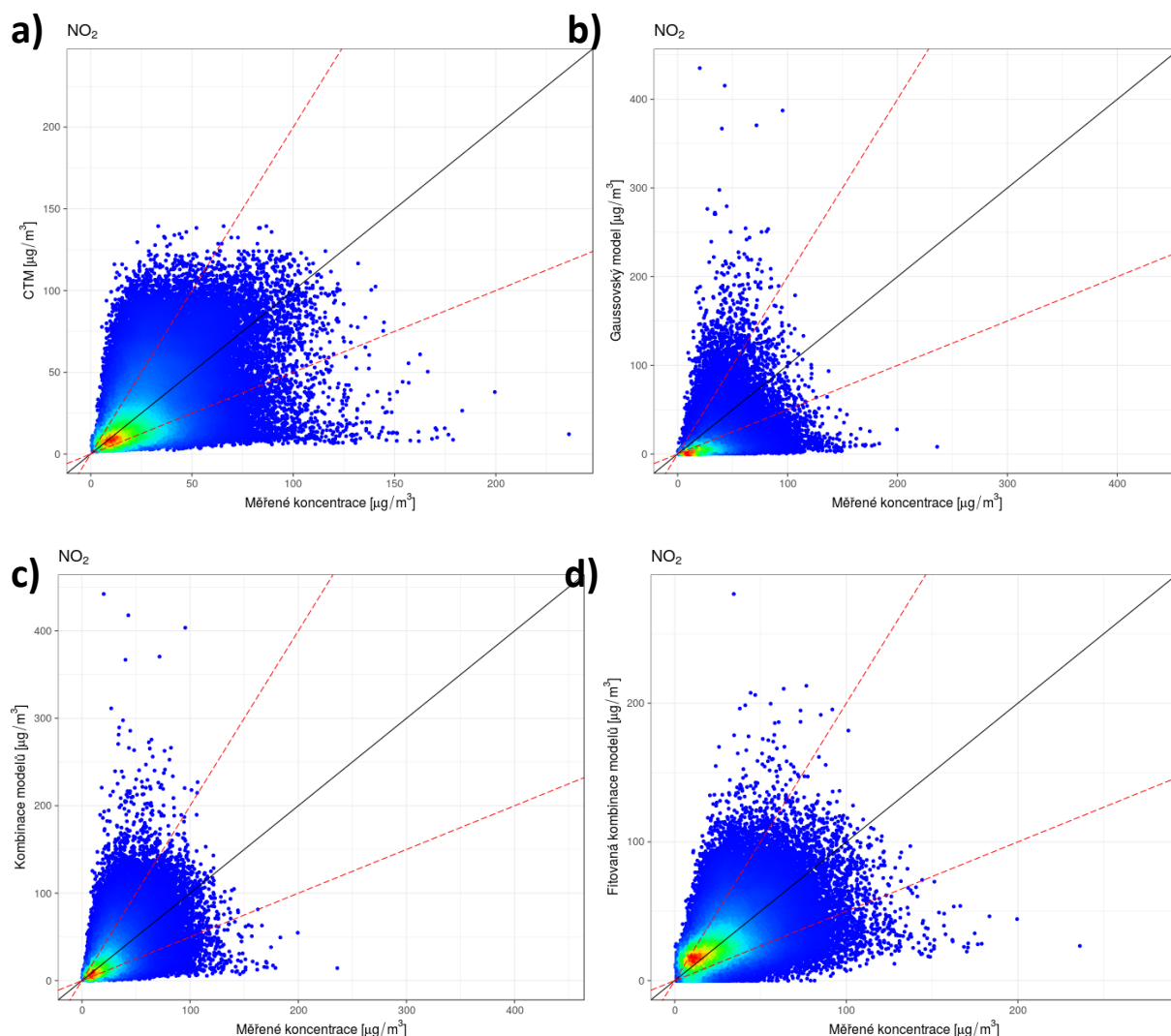
Tab. 1 PM₁₀ denní průměry – statistiky v souhrnu pro všechny použité stanice.

Statistika / Model	Průměr měření	Průměr model	MFB	MFE	Target	R	IOA	FAC2	RDE
CTM	22.6	21.1	-0.11	0.61	1.51	-0.05	0.34	0.60	0.19
Gauss	22.6	12.1	-0.58	0.63	1.06	0.65	0.63	0.56	0.48
Kombinace	22.6	24.5	0.04	0.33	0.75	0.76	0.86	0.89	0.25
Fitovaný model	22.6	23.0	0.01	0.30	0.63	0.79	0.89	0.91	0.16

4.2 Oxid dusičitý



Obr. 9 NO₂ – mapy pro CTM (nahore), Gaussovský model (uprostřed) a výsledná fitovaná mapa (dole). Roční průměr (vlevo) a 19. nejvyšší hodinový průměr (vpravo) – barevná škála stejná vždy pro levý/pravý sloupec.

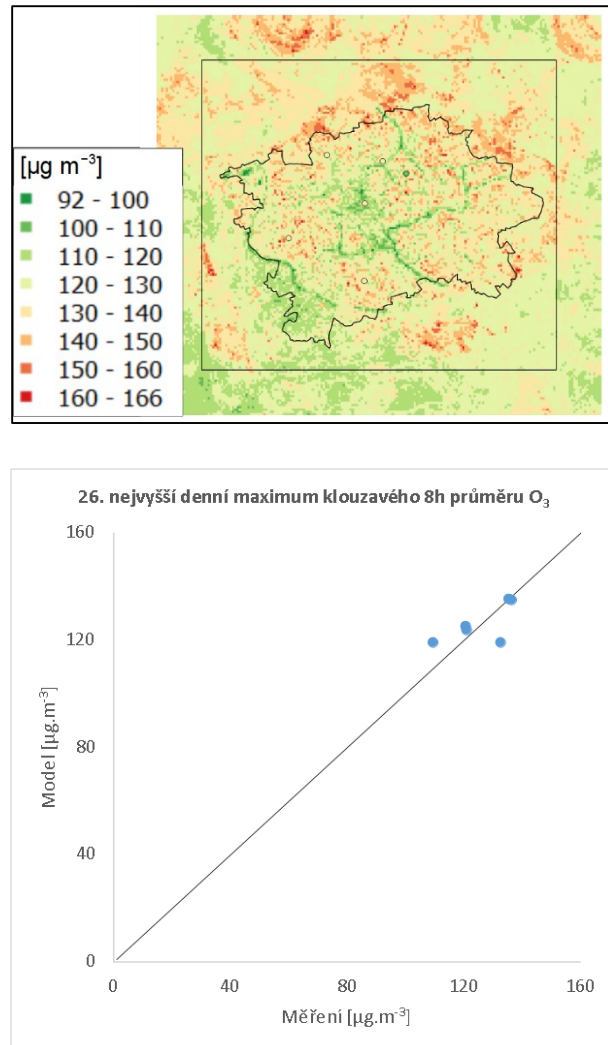


Obr. 10 NO₂ – scatterploty hodinových průměrů pro CTM (a), Gaussovský model (b), kombinaci CTM a Gaussovského modelu (c) a výsledný model fitovaný na stanici (d).

Tab. 2 NO₂ 1h průměry – statistiky v souhrnu pro všechny použité stanice.

Statistika / Model	Průměr měření	Průměr model	MFB	MFE	Target	R	IOA	FAC2	RDE
CTM	28.2	27.4	-0.12	0.55	1.14	0.47	0.68	0.65	0.12
Gauss	28.2	12.6	-1.01	1.10	1.38	0.38	0.57	0.24	0.81
Kombinace	28.2	30.1	-0.08	0.54	1.27	0.51	0.68	0.66	0.87
Fitovaný model	28.2	28.3	-0.02	0.52	1.03	0.50	0.70	0.70	0.27

4.3 Ozon



Obr. 11 Ozon – nahoře výsledná mapa 26. nejvyššího denního maxima klouzavého 8hod. průměru. Staniční měření jsou zobrazena kolečky. Dole scatterplot této statistiky.

5 Novost a poznámky k praktické aplikaci metodiky

Modelové hodnocení na úrovni aglomerací v rozlišení vyšším, než 1 km bylo v České republice doposud prováděno Gaussovskými rozptylovými modely. To s sebou neslo následující omezení:

- Byly zohledněny pouze příspěvky místních zdrojů;
- Imisní pozadí bylo zpravidla zahrnuto přičtením konstantního členu k výstupu Gaussovského modelu. Kromě problematiky jeho stanovení tak bylo konstantní v prostoru;
- Gaussovské modely neumožňovaly přímý výpočet krátkodobých imisních charakteristik (n-té nejvyšší hodinové, resp. denní koncentrace), pro něž jsou stanoveny imisní limity;
- Kalibrace na staniční měření, pomineme-li zahrnutí imisního pozadí formou konstanty, nebyla prováděna.

Předložená metodika tyto nedostatky odstraňuje. Navíc v porovnání s celorepublikovými mapami kvality ovzduší zveřejňovanými Českým hydrometeorologickým ústavem v rozlišení 1 x 1 km umožňuje na omezené

oblasti získat detailnější informaci o rozložení znečištění ovzduší. Navržený způsob kalibrace modelu na staniční měření má navíc i potenciál upozornit na konkrétní nedostatky vstupních modelových dat a může tak vést k jejich zdokonalení a odstranění skrytých chyb.

Uvedený postup má ale i některé charakteristiky/omezení, které je třeba vzít v úvahu při interpretaci získaných výsledků:

- Způsob, jakým musí být interpretovány výsledné mapy, závisí na druhu lokálního modelu. V případě Gaussovského modelu je hlavním omezením nemožnost popsat kvalitu ovzduší uvnitř uličních kaňonů a výsledné mapy představují kvalitu ovzduší na úrovni střech budov.
- Přestože metodika zajišťuje díky kalibraci maximální shodu výsledných map se staničními měřeními, je třeba mít v patrnosti, že nezaručuje, aby takto získané hodnoty zprůměrované do odpovídající sítě 1 x 1 km přesně odpovídaly hodnotám v mapách kvality ovzduší vydávaných ČHMÚ. Na tento samozřejmý fakt (jedná se o různé přístupy k tvorbě map) upozorňujeme proto, že 5leté průměry map ČHMÚ jsou ze zákona závazné pro rozhodování, zda je třeba při povolování provozu zdroje uložit kompenzační opatření⁶.
- Při kalibraci se pracuje s daty ze všech stanic bez ohledu na charakter lokality, v níž se nachází. Přitom lze předpokládat, že parametry kalibračního modelu by se lišily např. pro dopravní a městské pozadové stanice. K tomuto zjednodušení ale bylo nutné přistoupit z toho důvodu, že v praxi se bude uživatel metodiky v praxi potýkat s nedostatečným počtem měřicích stanic. Ten neumožňuje, aby byl model nakalibrován zvlášť pro jednotlivé typy lokalit a aby byly takto získané dílčí mapy kombinovány např. za pomoci dat o využití zemského povrchu.
- Dopočet přízemní koncentrace ozonu z koncentrací oxidů dusíku za předpokladu semi-stacionárního stavu vede k výraznému nadhodnocení výsledků, zejména na pozadových (ne dopravních) lokalitách. I po provedení korekce výsledných map na staniční měření je nutné brát získané mapy spíše jako indikativní. V budoucnu lze praktické řešení těchto omezení očekávat skrz aplikaci lokálních modelů zahrnujících komplexní chemismus⁷.
- Důležité je zmínit, že uvedená kalibrace modelu na staniční měření předpokládá zapojení školeného statistika, který má zkušenosti se semi-parametrickými regresními modely. Autoři metodiky jsou přesvědčeni, že ani podrobný popis jednotlivých kroků kalibrace by nezaručil její správné použití neškolenou osobou a píše by mohl být zdrojem chyb. Z toho důvodu je i popis kalibrace spíše obecný s cílem poukázat na doporučenou metodu a její možné vedlejší přínosy.

6 Popis uplatnění a ekonomické aspekty

Lze předpokládat, že navržený způsob modelového hodnocení bude využit zejména pro aglomerace, případně jiná velká města. Kromě vyšší náročnosti na vstupní data a časovou i odbornou náročnost zpracování je to dáno i souvisejícími vyššími ekonomickými náklady v porovnání s tradičním hodnocením využívajícím pouze Gaussovské rozptylové modely.

7 Závěr

Předkládaná metodika popisuje způsob kombinace výstupů modelu imisního pozadí a lokálního modelu za účelem získání informace o prostorovém rozložení znečištění ovzduší v rozlišení desítek až stovek metrů. Tímto způsobem je možné zohlednit jak příspěvky vzdálených zdrojů, kdy při transportu na velké vzdálenosti dochází k tvorbě sekundárních znečišťujících látek (sekundární aerosoly, oxid dusičitý), tak výrazné gradienty koncentrací

⁶ Zákon č. 201/2012 Sb. o ochraně ovzduší, § 11, odst. 5 a 6

⁷ V rámci projektu Urbi Pragensi (projekt operačního programu Praha – pól růstu ČR č. CZ.07.1.02/0.0/0.0/16_040/0000383) bude v lokálním měřítku testováno využití CFD modelu PALM. Je možné, že horizontu několika let bude reálně uvažovat o aplikaci tohoto modelu využívajícího RANS jádra na území celé aglomerace.

v bezprostřední blízkosti zdrojů. Modelem imisního pozadí může být chemický transportní model a lokálním modelem Gaussovský rozptylový model, ale popsáný postup je obecný a v principu je možné využít i jiných modelových vstupů. Nutným předpokladem pro aplikaci uvedeného postupu je existence dostatečného počtu měřících stanic v předmětné oblasti, která umožní kalibraci modelového výstupu na staniční měření. Při dopočtu koncentrací ozonu na základě předpokladu chemické rovnováhy mezi oxidy dusíku a ozonem je potřeba získané výsledky korigovat na staniční měření a považovat je spíše za indikativní.

8 Literatura

- Anderson, D. R., 2008. Model Based Inference in the Life Sciences, Springer.
- Atkinson, R.A. et al. 2010. Evaluated kinetic and photochemical data for atmospheric chemistry - IUPAC subcommittee on gas kinetic data evaluation for atmospheric chemistry. January 3, 2010
- ČHMÚ, 2017: Znečištění ovzduší na území České republiky v roce 2016. WWW:
http://portal.chmi.cz/files/portal/docs/uoco/isko/grafroc/16groc/gr16cz/Obsah_CZ.html
- ENVIRON, 2014: CAMx v6.1 User's Guide. WWW: www.camx.com
- Hastie, T.J., Tibshirani, R.J., 1993. Varying-coefficient models. J. Roy. Statist. Soc. B. 55 757–796.
- IUPAC, 2014. Evaluated Kinetic Data for Atmospheric Chemistry. Project No. 2011-049-1-100. WWW:
<https://iupac.org/projects/>
- Madsen, H., Thyregod, P. 2011. Introduction to General and Generalized Linear Models. Chapman & Hall/CRC.
- R Core Team (2017). R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. URL <https://www.R-project.org/>.
- Ruppert, D., Wand, M.P., Carroll, R.J., 2003. Semiparametric Regression. Cambridge University Press.
- Scire J.S. et al., 2000: A user's guide for the CALMET meteorological model (Version 5.0)
<http://www.src.com/calpuff/calpuff1.htm>.
- Svobodová, H. et al., 2018: Vybrané kapitoly ze socioekonomické geografie České republiky. Multimediální elektronický výukový materiál. [cit. 10. 1. 2018] Dostupné na WWW:
<https://is.muni.cz/do/rect/el/estud/pedf/js13/geograf/web/index.html>.
- Wood, S.N., 2010. Generalized additive models: an introduction with R. Chapman & Hall/CRC.

Přílohy

Příloha 1. Rešerše metod mapování kvality ovzduší na městské úrovni

Protože je na ni v textu odkazováno, je v této příloze uvedena rešerše prací zabývajících se modelování kvality ovzduší na městské úrovni, která byla zpracována v rámci zakázky MŽP „Analýza imisních dat v dopravně zatížených lokalitách ve vazbě na průběh meteorologických parametrů a fyzikálně-chemické procesy v ovzduší“ zpracovávané na konci roku 2016. Přestože není zcela vyčerpávající, podařilo se identifikovat několik přístupů, které jsou shrnuty níže. Podrobnější pozornost je pak věnována systematickým pracím VITO (Flemish Institute for Technological Research).

Kombinace regionálního a lokálního modelu

Přístup VITO

Jednu ze systematických snah o řešení této problematiky představují práce VITO (belgická výzkumná organizace <https://vito.be/en>) – např. Mensink a Cosemans (2008), Lefebvre a kol. (2011a, 2011b, 2013a, 2013b).

Mensink a Cosemans (2008) použili kombinaci belgického regulatorního Gaussovského modelu IFDM (EIONET, 2016) a modelu uličních kaňonů OSPM (Berkowicz a kol, 1997). Přístup ověřili na případě města Antwerpy. Model IFDM byl použit pro výpočet pozadových koncentrací se zahrnutím dopravních, průmyslových zdrojů a lokálního vytápění z Antwerp a 20–30km okolí (rozlíšení autoři neuvádějí). Pomocí modelu OSPM byly počítány koncentrace v uličních kaňonech (každých 10–15 m podél osy ulice). Dopravní emise byly v obou případech získány modelem MIMOSA. Aby nedocházelo k dvojímu započítávání dopravních emisí, byly liniové zdroje, jejichž příspěvky byly počítány modelem OSPM, odečteny od imisního pozadí získaného modelem IFDM (autoři přesný postup neuvádí, ale zřejmě tyto liniové zdroje nebyly zahrnuty do simulace modelem IFDM). Meteorologie byla reálná z meteorologického stožáru v Mol. Verifikace byla provedena na roční simulaci pro stanici Plantin en Moretuslei (uliční kaňon $5 \times V = 29 \times 20$ m, maximální hodinová intenzita dopravy cca 1250 vozidel). Modelové výsledky byly podhodnoceny, nicméně jak roční průměr PM_{10} a NO_2 , tak odpovídající percentily 24hod. (PM_{10}) a 1hod. (NO_2) průměrů se nacházejí v toleranci 15 % od naměřených hodnot.

Lefebvre a kol. (2011b) publikovali verifikaci modelového řetězce MIMOSA (emisní model) – AURORA (CTM) – IFDM (Gaussovský model), jehož cílem bylo popsat koncentrační gradienty elementárního uhlíku v blízkosti dopravních komunikací. Článek podrobně popisuje postup, který má zabránit dvojímu započítávání dopravních emisí:

$$C = (C_B - \bar{C}_{T,R})_{int} + C_T \quad (1)$$

Postup je znázorněn na obrázku P-1 a popsán v následujících bodech (uvedené kroky byly prováděny pro každou hodinu integrace modelu):

- A. Je získána pozadová koncentrace C_B (zde z modelu AURORA; rozlišení $3 \times 3 \text{ km}^2$)
- B. V pravidelném gridu s vyšším rozlišením, než má model pozadové koncentrace, je Gaussovským modelem spočten příspěvek dopravy $C_{T,R}$ (zde rozlišení $0,48 \times 0,48 \text{ km}^2$)
- C. Příspěvek dopravy je zprůměrován do gridu, ve kterém je udána pozadová koncentrace $\bar{C}_{T,R}$
- D. Interpolovaný příspěvek dopravy je odečten od pozadové koncentrace ($C_B - \bar{C}_{T,R}$)
- E. Pozadová koncentrace očištěná od příspěvku dopravy je bilineárně interpolována do pravidelného gridu Gaussovského modelu ($C_B - \bar{C}_{T,R})_{int}$
- F. Gaussovským modelem je opět spočten příspěvek dopravy, tentokrát v síti referenčních nodů sledujících komunikaci C_T (Obr. P-2).
- G. Výsledná koncentrace C je získána sečtením výsledků kroků E a F.

V krocích A a B byla použita meteorologie z NWP modelu ARPS. V kroku F pak skutečná meteorologie získaná během měřicí kampaně Chemkar (viz dále).

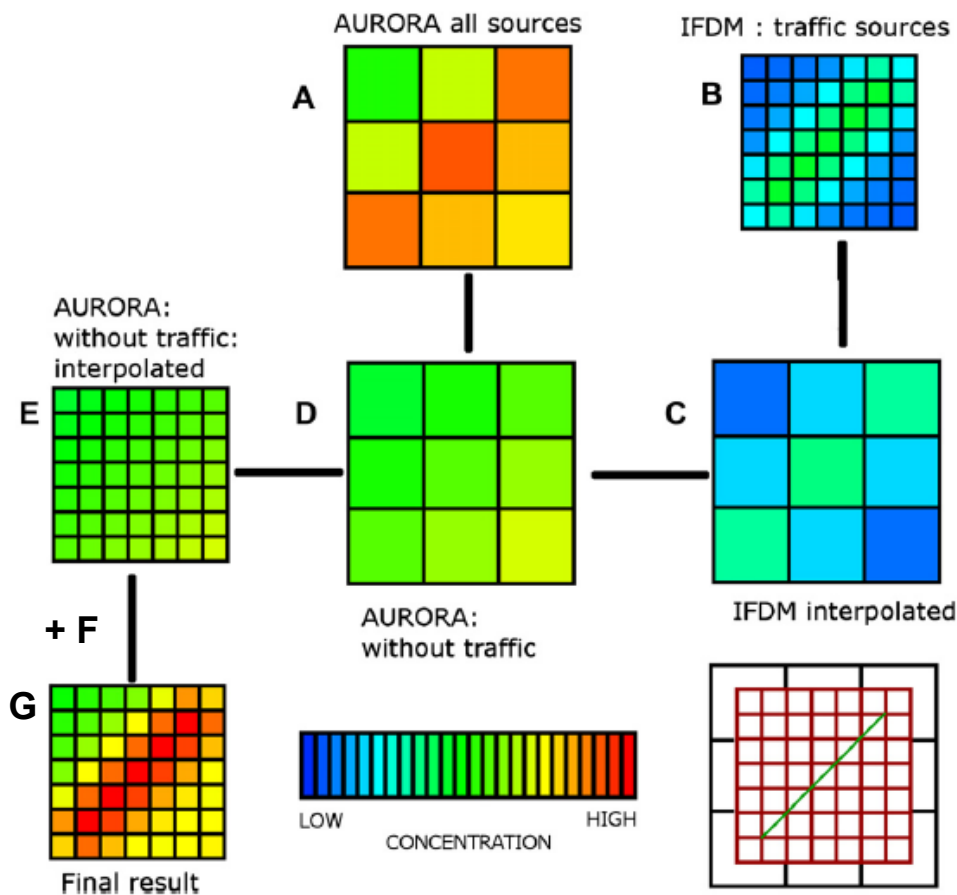
Jednotlivé části modelového systému i celkové výsledky byly porovnány s výsledky dvou ročních měřicích kampaní Chemkar 1 a 2 (každý 6. den 24hod. odběry PM_{10} s následnou analýzou EC). Porovnávány byly průměrné

hodnoty za kampaň pro danou stanici a výsledky tak vypovídají o schopnosti modelu pochytit prostorovou proměnlivost dat. Vyhodnocována byla korelace, průměr přes stanice, odchylka a střední kvadratická chyba. V souhrnu lze říci, že kombinace CTM a Gaussovského modelu nepřinesla jednoznačné zlepšení ani zhoršení statistik oproti případu, kdy byl použit jen CTM model. Nicméně vzhledem k tomu, že takto bylo získáno detailnější pole koncentrací, lze výsledky interpretovat tak, že navržený způsob kombinace modelů s odstraněním dvojího započítávání emisí je metodicky správný a výsledná podrobnější mapa věrohodná.

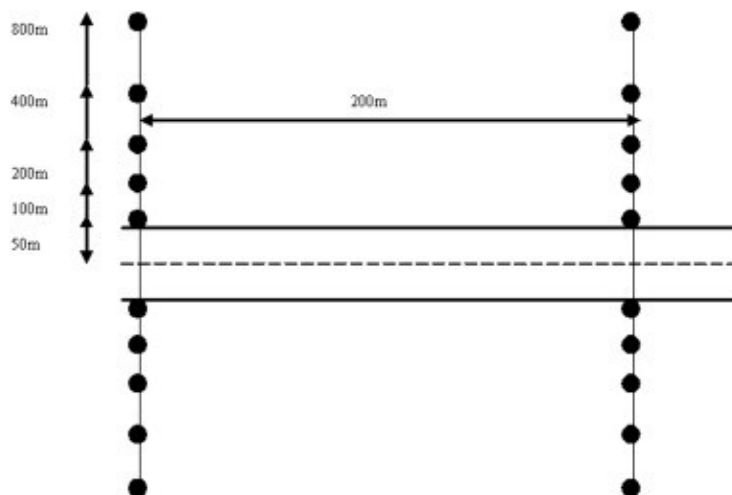
Lefebvre a kol. (2013a) použili obdobný postup, jako Lefebvre a kol (2011b) pro vytvoření modelového řetězce, který by umožnil podrobně zkoumat expozici obyvatelstva znečištění z dopravy. Pozornost zaměřili na PM_{10} , NO_2 a O_3 . Namísto CTM modelu však použili interpolační model RIO, který pro každou hodinu vytvářel požadové mapy PM_{10} , NO_2 a O_3 . Požadová mapa NO pak byla vytvářena na základě předpokladu rovnováhy mezi požadovými koncentracemi NO_2 a O_3 . Obdobně použili postup zabraňující dvojímu započítávání emisí a to odděleně pro NO , NO_2 a NO_x . Podrobné příspěvky od liniových zdrojů v referenčních bodech sledujících silnici pak byly spočítány IFDM za využití jeho chemického modulu (rychlost přeměny NO a NO_2 závisí na výšce slunce a okolní teplotě; dále se uplatňuje předpoklad zachování celkové koncentrace NO_x a O_3).

Verifikace byla provedena pro roční simulaci oproti 1hod. měřením na cca 30 stanicích na území Flander. Schopnost vystihnout prostorovou variabilitu byla hodnocena na základě ročních průměrů: odchylka byla pro všechny látky pod $\pm 10\%$ a RMSE mezi 8 a 22 % průměru ze všech stanic. R^2 se pohyboval mezi 0,45 a 0,68. Schopnost postihnout časový vývoj byla hodnocena na základě 1hod. průměrů: střední absolutní odchylka byla pro všechny látky pod 15 % a RMSE mezi 21 a 33 % průměru ze všech stanic. R^2 se pohyboval mezi 0,76 a 0,92. Modelu se také podařilo velmi přesně vystihnout roční, týdenní a denní chod koncentrací (hodnoceno na základě průměru přes všechny stanice). Významnou měrou k tomu přispělo zahrnutí časově proměnných dopravních emisí.

Inspirativní je způsob, jakým byly v tomto případě počítány dopravní intenzity, které sloužily jako vstup do emisního modelu MIMOSA. Na základě demografických, socioekonomických a dalších dat byla modelem Feathers vytvořena matice výchozích a cílových míst (origin destination matrix). S využitím informací o nákladní dopravě a silniční síti pak byly modelem Transcad spočteny **dynamické dopravní zátěže**. Jedná se o výrazně pokročilejší a přesnější postup, než odvozování hodinových intenzit na základě měsíčních, denních a hodinových faktorů. Tento přístup má navíc tu výhodu, že zároveň poskytuje informace o poloze obyvatel v daném časovém okamžiku. Spolu s informací o koncentraci v daném místě pak lze použít pro dynamické hodnocení expozice.



Obr. P-1 Způsob kombinace pozadového modelu a Gaussovského modelu s vyšším rozlišením (upraveno z Lefebvre a kol. (2011b)).



Obr. P-2 Síť referenčních bodů sledujících komunikaci. Ilustrační obrázek z Lefebvre a kol. (2011a), který neodpovídá přesně konfiguraci použité v Lefebvre a kol. (2011b).

Žádný z výše uvedených článků, které se řešily problematiku přesnějšího popisu prostorového rozložení znečišťujících látek, nebral v úvahu situaci v uličních kařonech. V článku [Lefebvre a kol. \(2013b\)](#) byl postup modifikován a představen řetězec RIO – IFDM – IFDM street canyon. Na rozdíl od postupu uvedeného v Lefebvre a kol. (2011b), byl Gaussovský model IFDM použit pouze pro silnice neuzavřené v oboustranném uličním kařonu.

V případě oboustranného kaňonu pak byl použit model IFDM street canyon, který je zjednodušenou variantou dánského modelu OSPM. Modelový řetězec byl použit pro město Antwerpy. Verifikace byla provedena pro týdenní průměry NO₂ (výsledek měření pasivními vzorkovači – 5 týdnů na podzim a 5 týdnů na jaře). Vzhledem k charakteru měřicí kampaně byla posuzována pouze schopnost postihnout prostorovou proměnlivost. Z hlediska vylepšení modelu se jako zásadní ukázalo zahrnutí modelu IFDM (výrazně snížila se RMSE a vzrostl R²). Zahrnutí uličního modelu IFDM street canyon pak vedlo k mírnému zlepšení statistik a hlavně k postižení všech lokalit, u nichž měření indikovalo možnost překročení ročního imisního limitu. Podrobná verifikace je k dispozici v Lefebvre a Vranckx (2013c) a dále Hofman a kol. (2014).

Další práce

Isakov a kol. (2007) se zabývali vlivem subgridové variability výstupů CTM (model CMAQ) na hodnocení rizik. Pro její vyhodnocení zkombinovali výsledky modelu CMAQ (C_{CTM} , rozlišení 4 x 4 km) s disperzním modelem ASPEN (C_{local} , rozlišení 200 x 200 m). Aby předešli dvojímu započítávání emisí zahrnutých do výpočtu disperzním modelem, odečetli nejprve ročních průměrů získaných modelem CMAQ roční průměry z disperzního modelu zprůměrované přes odpovídající grid CTM modelu:

$$C_{Adjusted} = C_{CTM} - \bar{C}_{local} + C_{local} \quad (2)$$

Jedná se tedy o jednodušší variantu postupu použitého v Lefebvre a kol (2011a). Uvedený postup vedl k lepší shodě (ve dvou případech ze tří k výrazně lepší) mezi modelovanou a naměřenou průměrnou roční koncentrací benzenu, resp. formaldehydu (stanice ve městě Philadelphia, Pennsylvania, USA).

Autoři zároveň uvedli srovnání průměrné roční koncentrace vypočtené modelem CMAQ a výstupů z disperzního modelu zprůměrovaných přes odpovídající grid CTM modelu. Výsledky se shodovaly v rámci faktoru 2 (rozmezí 0,5- až 2násobku výsledků CTM modelu). Ve většině případů byly ale zprůměrované výsledky disperzního modelu vyšší, než CTM modelu. Vzhledem k rovnici (2) to nutně znamená, že v některých referenčních bodech museli získat záporné koncentrace. Tato věc nebyla v článku komentována.

Stein a kol. (2007) se pokusili získat podrobnější informaci o prostorové proměnlivosti koncentrací benzenu na území města Houston, TX, USA. Byly provedeny dvě simulace:

1. Referenční simulace modelem CMAQ se zahrnutím všech zdrojů a rozlišením 1 x 1 km²
2. Hybridní přístup – byly sečteny výsledky následujících simulací: simulace modelem CMAQ s rozlišením 1 x 1 km² a bez zahrnutí významných bodových a liniových zdrojů („zero-out“ přístup); bodové zdroje byly modelovány Lagrangeovským modelem HYSPLIT; liniové Gaussovským modelem AERMOD.

Výsledky 10denní simulace byly porovnány s měřením benzenu na stanicích – během tohoto období byly ve dvou dnech dostupné denní průměry benzenu vždy na 5 z celkem 6 stanic. Hybridní přístup vedl ve většině případů k lepší shodě mezi měřenými a modelovanými hodnotami.

Autoři zároveň provedli srovnání referenční a „zero-out“ simulace modelem CMAQ, který měl reprezentovat vliv lokálních zdrojů na výstupy CTM modelu. U této 10denní simulace byl rozdíl méně, než 10%.

Pozn. benzen se jeví jako vhodná látka pro tento postup: doba setrvání v atmosféře (cca 12 dní) je výrazně větší ve srovnání s dobou setrvání na zkoumaném území – proto je možné u lokálního rozptylu zanedbat chemické reakce. Na druhou stranu pro popis imisního pozadí je již třeba použít chemický transportní model.

Isakov a kol. (2009) použil hodnocení zdravotních dopadů v New Heaven, CT, USA hybridní přístup uvedený v Stein a kol. (2007). Příspěvky vybraných bodových a liniových zdrojů byly modelovány pomocí Gaussovského modelu AERMOD. Na rozdíl od výše uvedené práce ale v CTM zahrnuli všechny zdroje s poukazem na předpoklad nízkého příspěvku lokálních zdrojů k výsledkům CTM modelu. Modely byly kombinovány pro každou hodinu zvlášť. Výsledný model nebyl pro danou lokalitu verifikován.

Beevers a kol. (2012) se zabývali kombinací regionálního chemického modelu CMAQ a Gaussovského modelu ADMS pro Londýn s rozlišením 20 m x 20 m. CMAQ nad Londýnem byl napočítán s rozlišením 3 km a poté

interpolován do rozlišení 20 m x 20 m. Model ADMS je pak na tomto rozlišení přičten. Možnou inspirací je přístup ke Gaussovskému modelování pomocí „jádrové metody“ (kernel method). Metoda umožňuje napočítat rozložení koncentrací pro různé kategorie silnic (otevřené silnice, různé typy uličních kaňonů apod.) jako odezvu na jednotkovou emisi předem a umožňuje tak efektivnější výpočet. Chemické procesy probíhající v blízkosti silnice byly popsány jednoduchým schématem z Carslaw a Beevers (2005). Autoři prezentují rozsáhlou validaci popsaného přístupu pro NO_x , NO_2 a O_3 . Výsledky pro NO_2 a O_3 jsou dobré – 73% resp. 61% se neodchyluje od měření více jak o faktor 2. Pro NO_x jsou výsledky horší a pravděpodobným důvodem jsou nedostatečně popsané emise. Autoři také testovali efekt dvojího započtení koncentrací. Z 39 testovaných lokalit se ukázalo, že chyba, která takto vzniká, je velmi malá (0,42% medián, maximum 4,5%).

Speciální modely zohledňující vliv liniových zdrojů

Sokhi a kol. (2008) popisují využití softwaru OSCAR. Článek se nezabývá přímo kombinací různých modelů, spíše je zaměřen na popis různých přístupů zahrnutí silnic, které jsou v nástroji OSCAR implementovány. Zmíněny jsou tři úrovně přístupu k problému. Nejjednodušší přístup spočívá v odhadu koncentrací na základě regresních vztahů, v závislosti na intenzitě dopravy a rychlosti větru. Druhá úroveň zahrnuje použití modelu CAR II, což je semi-empirický parametrizovaný model, umožňuje zahrnout silnici jak v otevřeném terénu, tak v uličním kaňonu (na základě různých předdefinovaných geometrií). Zahrnuta je i parametrická rovnice zohledňující chemismus pro NO_2 . Výsledná koncentrace v blízkosti silnic, je pak získána jako prostý součet výstupů z modelu CAR II, městského pozadí a regionálního pozadí. Poslední úroveň pak je modelování pomocí Gaussovského modelu CAR-FMI. Přístup byl validován na dvou dopravních lokalitách v Londýně a Helsinkách pro roční průměry NO_2 a PM_{10} . Lepší shody bylo dosaženo pro méně dopravně zatíženou stanici Vallila (Helsinki), horší pak pro výrazně dopravně zatíženou stanici Cromwell Road (Londýn). Autoři uvádí, že semi-empirický model CAR II dosahuje dobrých výsledků v případě dlouhodobých průměrů. Pro detailnější výpočet (hodinové koncentrace) bylo potřeba použít model CAR-FMI.

Přístupy založené na GIS

Akita a kol. (2014) se zajímali o zachycení variability koncentrace v rámci města a následného aplikování na velké geografické domény. Vyvinuli geostatistickou metodu, založenou na Bayesově maximální entropii (BME - Bayesian Maximum Entropy), kombinující výsledky existujícího regresního modelového přístupu využití půdy LUR (land use regression modeling) a chemických transportních modelů CTM spolu s pozorováním. Přístup ověřili na případě průměrné roční koncentrace NO_2 v regionu Katalánska ve Španělsku pro rok 2009.

Odhad průměrné roční koncentrace NO_2 podle LUR s rozlišením 1 x 1 km^2 byl založen na regresi mezi intenzitou dopravy na hlavních silnicích, délkou cest, využitím půdy a průměrné roční koncentrací NO_2 pozorované na 80 stanicích s pasivními vzorkovači (ESCAPE data). Pole průměrné roční koncentrace NO_2 podle CTM pro území Španělska bylo taktéž vypočteno modelem CALIOPE s rozlišením 4 x 4 km^2 . Údaje z 61 měřících stanic byly použity jako samostatná sada pro hodnocení navrhovaného přístupu.

Validace proběhla porovnáním naměřených a namodelovaných hodnot v místech měřících stanic pomocí 6 metod:

1. Koncentrace je stanovena na základě trendu zjištěného z CALIOPE modelu. RMSE této metody je 13,16 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$.
2. LUR model je přímo aplikovaný pro výpočet koncentrace. RMSE je 13,27 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$.
3. Běžný kriging je aplikovaný na ESCAPE data. RMSE je 22,17 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$.
4. Běžný kriging je aplikovaný na spojené ESCAPE a LUR data. RMSE je 12,65 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$.
5. Jednoduchý kriging je aplikovaný na ESCAPE data, které jsou upraveny o trend z CALIOPE modelu. RMSE je 9,21 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$.
6. Jednoduchý kriging je aplikovaný na spojené ESCAPE a LUR data. Údaje jsou upraveny o trend získaný z CALIOPE modelu. Tato metoda je doporučena autory. RMSE je 7,6 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$.

Poslední metoda je autory doporučena, nicméně je nutné klást důraz na kvalitu vstupních údajů.

Gulliver a Briggs (2011) popisují základní metodu STEMS-Air (Space Time Exposure Modelling System — Air pollution) založenou na Gaussovském modelu disperze. Jejich zaměření je modelování krátkodobých (denních) koncentrací znečišťujících látek. Příspěvky zdrojů jsou uvažovány jenom z 300 m okolí receptoru ve směru větru.

Přístup byl odzkoušen na případě Londýna. Průměrné denní koncentrace PM₁₀ byly stanoveny pro období červenec–prosinec 2007. Roční průměr PM₁₀ byl stanoven pro roky 2001–2003. Informace o dopravní intenzitě a zastoupení těžkých a lehkých vozidel byly převzaty z Londýnského atmosférického emisního inventáře v podobě ročních průměrů denní dopravy. Tyto údaje následně vstupovaly do emisního modelu. V případě denních průměrů, data ze 4 stanic obsahující informace o intenzitě dopravy, meteorologii a koncentraci PM₁₀ byly použity na vytvoření časově proměnných emisních profilů aplikovaných na silnice do vzdálenosti 300 m od stanic a taky na následnou validaci. K namodelovaným hodnotám byly připočteny pozadřové koncentrace. R² se pohybovalo mezi 0,41 a 0,61. V případě ročních průměrů, bylo na validaci použito 30 monitorovacích stanic. R² se pohybovalo mezi 0,67 a 0,77.

Pro vylepšení modelu, byla následně aplikována lineární regrese. Je nutné podotknout, že použitá rychlost větru neodpovídala lokálním podmínkám a tedy hodnota R² by mohla být ještě vylepšena použitím reálných hodnot rychlosti.

CFD modely

Další z možností je využití CFD modelů. Na území města Brno byly tyto modely aplikovány skupinou kolem docenta Pospíšila z Fakulty mechanického inženýrství na Vysokém učení technickém v Brně (Pospíšil a Jícha 2010, 2011). Jednalo se ale spíše o práce výzkumného charakteru. **Kwak a kol. (2015)** se zabývali kombinací CFD modelu (založeného na metodě Reynoldsova průměrování Navier-Stokesových rovnic) a modelu CMAQ. Výstup z modelu CMAQ pak tvoří počáteční a/nebo okrajovou podmínku pro CFD model. Zahrnutí CFD modelu představovalo výrazné zlepšení shody koncentrací NO₂ a O₃ s pozorovanými hodnotami. Vzhledem k vysoké výpočetní náročnosti se hodí spíše pro výpočty na menších oblastech (~1 km x 1km).

Využití modelu CALPUFF

Dalším přístupem modelování znečištění v městském a příměstském prostředí je využití Lagrangeovského puff modelu CALPUFF, který využívá meteorologický procesor CALMET. Pro modelování koncentrací znečištění v blízkosti dopravních tepen má však omezení především v použitém rozlišení (10² m) a velikosti domény (>10 km). Další omezení tohoto přístupu spočívá také v malém počtu publikovaných prací a tudíž menší možnost detailnějšího srovnání.

Ghannam a El-Fadel (2013)

- **Lokalita:** Beiruth a okolí 60 km, středomořská města
- **Modelované látky:** CO, NO_x and PM₁₀
- **Modelovací doména:** 50 x 50 km, 500 m grid
- **Zdroj emisí:** energetika, automobilová doprava, těžba
- Přijatelná schopnost zachytit časové fluktuace koncentrací CO, NO_x a PM₁₀
- Možné využití v operativě
- Limitace práce spočívá v tom, že všechny skupiny zdrojů emitují stejně
- Nadhodnocení výsledných koncentrací

Holnicki a kol. (2015)

- **Lokalita:** Varšava, město a okolí 10–20 km
- **Modelované látky:** SO₂, NO_x, PM₁₀, PM_{2,5}, CO, C₆H₆
- **Modelovací doména:** 520 km², grid 500 m
- **Zdroj emisí:** bodové (energetický sektor, průmysl), plošné (obydlené domy), liniové (městská doprava)
- Hlavní cíl studie bylo validace modelu CALPUFF vztažené k časovému měřítku předpovědi a průměrování časového průměrování kroku

- Na jedné lokalitě uličního kařonu byly podhodnoceny hodnoty NO_x. Ostatní výsledky byly uspokojivé.

Yim a kol. (2010)

- **Lokalita:** Hong Kong, okolí několika měst
- **Modelované látky:** SO₂
- **Meteo doména:** 1) horizontální rozlišení 40,5 km (115x119 bodů), 2) 13,5 km (127 x 97 bodů).
- **Calmet:** horizontálně – 500 m, vertikálně 10 vrstev (10, 30, 60, 120, 230, 450, 800, 1250, 1850, 2600 m)
- **Zdroj emisí:** lodní doprava, automobilová doprava, elektrárny
- Studie hodnotí podíl znečištění jednotlivých velkých plošných zdrojů emisí

Literatura

- Akita et al., 2014. Large scale air pollution estimation method combining land use regression and chemical transport modeling in a geostatistical framework. *Environmental Science & Technology*, 48, 4452–4459. <http://dx.doi.org/10.1021/es405390e>
- ATEM, FD ČVUT, 2014. Vyhodnocení urbanistických záměrů pilotní akce UHI – WP6.2.2. Závěrečná zpráva červencem 2014. Zakázka pro projekt CENTRAL EUROPE 3CE292P3 Development and application of mitigation and adaptation strategies and measures for countertracing the global Urban Heat Island phenomenon.
- Beevers, S. D. et al., 2012. One way coupling of CMAQ and a road source dispersion model for fine scale air pollution predictions. *Atmospheric Environment*, 59, 47 – 58. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1352231012004840>
- Berkowicz, R. et al., 1997. Modelling traffic pollution in streets. Ministry of Environment and Energy National Environmental Research Institute.
- Bubník, J. a kol. Symos'97, Systém modelování stacionárních zdrojů: Metodická příručka, Praha 1998 (aktualizace 2013). http://www.mzp.cz/cz/zpracovani_rozptylovych_studii_metodika
- Carslaw, D. C., Beevers, S. D., 2005. Estimations of road vehicle primary NO₂ exhaust emission fractions using monitoring data in London. *Atmospheric Environment*, 39, 167–177. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1352231004008775>
- ČHMÚ, 2014. Znečištění ovzduší na území České republiky v roce 2013. [Air pollution in the Czech Republic in 2013.] Dostupné on-line: http://portal.chmi.cz/files/portal/docs/uoco/isko/grafroc/13groc/gr13cz/Obsah_CZ.html
- ČHMÚ, 2015a. Znečištění ovzduší na území České republiky v roce 2014. [Air Pollution in the Czech Republic in 2014.] [online]. [cit. 19. 1. 2015]. Dostupné z http://portal.chmi.cz/files/portal/docs/uoco/isko/grafroc/14groc/gr14cz/Obsah_CZ.html.
- ČHMÚ, 2015b. Znečištění ovzduší a atmosférická depozice v datech, Česká republika 2014. Souhrnný tabelární přehled. [Air Pollution and Atmospheric Deposition in Data, the Czech Republic, 2014. Summary Tabular Survey.] [online]. [cit. 19. 1. 2015]. Dostupné z http://portal.chmi.cz/files/portal/docs/uoco/isko/tab_roc/2014_enh/index_CZ.html.
- EIONET, 2016. MDS - Model Documentation System. <http://pandora.meng.auth.gr/mds/strquery.php?wholedb>
- Ghannam, K., El-Fadel, M., 2013. Emissions characterization and regulatory compliance at an industrial complex: An integrated MM5/CALPUFF approach. *Atmospheric Environment*, 69, 156–169. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S135223101201179X>
- Gulliver, J., Briggs, D., 2011. STEMS-Air: A simple GIS-based air pollution dispersion model for city-wide exposure assessment. *Science of The Total Environment*, 409, 2419 – 2429. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0048969711002543>
- Hofman, J. et al., 2014. Increasing the spatial resolution of air quality assessments in urban areas: A comparison of biomagnetic monitoring and urban scale modelling. *Atmospheric Environment*, 92, 130–140. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1352231014002854>

- Holnicki, P. et al., 2015. An urban scale application and validation of the CALPUFF model. *Atmospheric Pollution Research*, in press. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1309104215000732>
- Isakov, V. et al., 2007. Using CMAQ for exposure modeling and the importance of sub-grid variability for exposure estimates. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, **46**, 1354–1371. <http://dx.doi.org/10.1175/JAM2538.1>
- Isakov, V. et al., 2009. Combining Regional- and Local-Scale Air Quality Models with Exposure Models for Use in Environmental Health Studies. *Journal of the Air & Waste Management Association*, **59**, 461–472. <http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.3155/1047-3289.59.4.461>
- Kwak, K.-H. et al., 2015. Urban air quality simulation in a high-rise building area using a CFD model coupled with mesoscale meteorological and chemistry-transport models. *Atmospheric Environment*, **100**, 167–177. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1352231014008565>
- Lefebvre, W. et al., 2011b. Validation of the MIMOSA-AURORA-IFDM model chain for policy support: Modeling concentrations of elemental carbon in Flanders. *Atmospheric Environment*, **45**, 6705–6713. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1352231011008570>
- Lefebvre, W. et al., 2011a. Modeling the effects of a speed limit reduction on traffic-related elemental carbon (EC) concentrations and population exposure to EC. *Atmospheric Environment*, **45**, 197 – 207. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1352231010008010>
- Lefebvre, W. et al., 2013a. Presentation and evaluation of an integrated model chain to respond to traffic- and health-related policy questions. *Environmental Modelling & Software*, **40**, 160–170. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364815212002356>
- Lefebvre, W. et al., 2013b. Evaluation of the RIO-IFDM-street canyon model chain. *Atmospheric Environment*, **77**, 325–337. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1352231013003695>
- Lefebvre, W., Vranckx, S. (Eds.), 2013c. Validation of the IFDM-model for use in urban applications. Study accomplished in the framework of the ATMOSYS-project. Flemish Institute for Technological Research NV (“VITO”). Technical Report No 2013/RMA/R/56. Available on-line at: http://www.atmosys.eu/faces/doc/ATMOSYS_Deliverable_10_IFDM_Model_Validation.pdf
- Mensink, C., Cosemans, G. 2008. From traffic flow simulations to pollutant concentrations in street canyons and backyards. *Environmental Modelling & Software*, **23**, 288–295. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364815207001156>
- Pospíšil, J., Jícha, M., 2010. Particulate matter dispersion modelling along urban traffic paths. *International Journal of Environment and Pollution*, **40**, 26-35.
- Pospíšil, J., Jícha, M., 2011. Dispersion modelling of traffic particulate matter in city-scale area. *International Journal of Environment and Pollution*, **47**, 216-225.
- Sokhi R. S., a kol., 2008. An integrated multi-model approach for air quality assessment: Development and evaluation of the OSCAR Air Quality Assessment System. *Environmental Modelling & Software*, **23**, 268-281. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364815207000813>
- Stein, A. F. et al., 2007. A hybrid modeling approach to resolve pollutant concentrations in an urban area. *Atmospheric Environment*, **41**, 9410–9426. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1352231007007881>
- Venegas, L. E., Mazzeo, N. A., Dezzutti, M. C., 2014. A simple model for calculating air pollution within street canyons. *Atmospheric Environment*, **87**, 77 – 86. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1352231014000144>
- Yim, S. H. et al., 2010. Use of high-resolution MM5/CALMET/CALPUFF system: SO₂ apportionment to air quality in Hong Kong. *Atmospheric Environment*, **44**, 4850–4858. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1352231010007223>

Příloha 2. Statistiky použité při verifikaci

Průměr pozorování (observation):

$$\bar{O} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N O_i$$

Průměr model:

$$\bar{M} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N M_i$$

Střední relativní odchylka (mean fractional bias) – ideální hodnota 0:

$$MFB = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{M_i - O_i}{(M_i + O_i)/2}$$

Střední relativní chyba (mean fractional error) – ideální hodnota 0:

$$MFE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{|M_i - O_i|}{(M_i + O_i)/2}$$

Target – ideální hodnota 0:

$$Target = \frac{\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (M_i - O_i)^2}}{\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (O_i - \bar{O})^2}}$$

Pearsonův korelační koeficient – ideální hodnota 1:

$$R = \frac{\sum_{i=1}^N (M_i - \bar{M})(O_i - \bar{O})}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (M_i - \bar{M})^2} \cdot \sqrt{\sum_{i=1}^N (O_i - \bar{O})^2}}$$

Index shody (index of agreement) – ideální hodnota 1:

$$IOA = 1 - \frac{N \cdot \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (M_i - O_i)^2}{\sum_{i=1}^N (|M_i - \bar{O}| + |O_i - \bar{O}|)^2}$$

Relative directive error (ideální hodnota 0):

$$RDE = \frac{|O_{LV} - M_{LV}|}{LV}$$

kde LV je imisní limit, O_{LV} naměřená hodnota nejbližší k imisnímu limitu a M_{LV} modelová hodnota odpovídajícího pořadí v seřazené řadě modelových hodnot, jako je pořadí O_{LV} v seřazené řadě pozorování.

Faktor dvou – ideální hodnota 1:

$$FAC2 = \frac{1}{N} \sum n_i, \text{ kde } n_i \begin{cases} 1 & \text{pro } 0.5 \leq |M_i/O_i| \leq 2 \\ 0 & \text{ostatní} \end{cases}$$